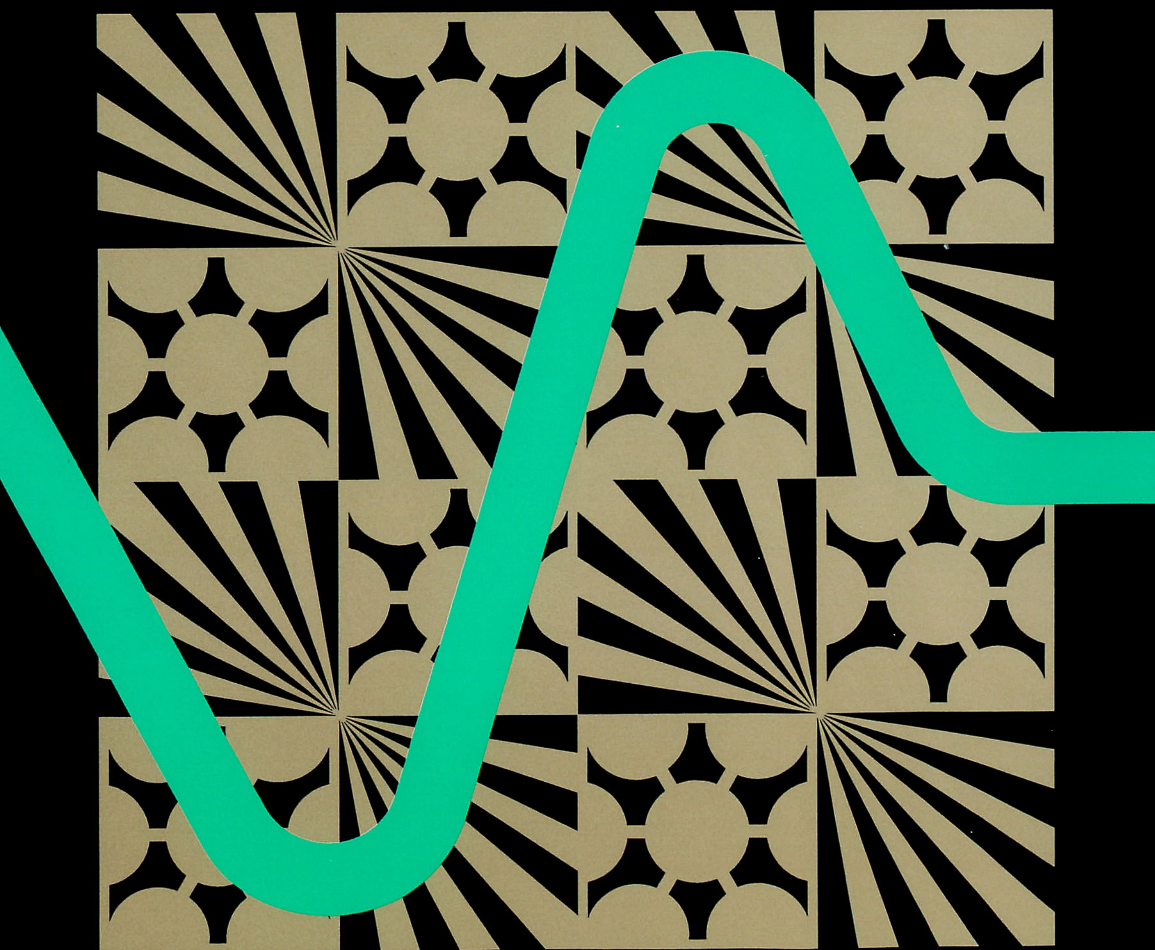
量子力学 I

猪木慶治・川合　光／著



講談社サイエンティフィク

量子力学 I

猪木慶治・川合　光／著

講談社サイエンティフィク

序　　文

現代物理学のどの分野を学ぶにも，いまや量子力学の理解は必要不可欠なものになっているといっても過言ではなかろう．

本書は，数年にわたって東京大学理学部物理学科3年生の前期と後期で行ってきた量子力学の講義をもとにし，大幅に改良を加え発展させながらできあがったものである．学生諸君や同僚研究者との多くの論議は説明の仕方をわかりやすくするのに大いに役立った．

量子力学に親しんでゆくためには，概念の理解とともに演習問題を実際に自分で解いてゆくことが有益であるという教訓を最大限に取り入れたのが本書の特色である．したがって，内容の理解を助けるために，例題をふんだんに取り入れた．また，節末には節末問題と解説を加え，内容の理解がさらに深まるよう配慮した．各章末には，さらに高度な問題や，本文でふれることのできなかった概念をも章末問題として取り上げ，全問題に詳しい解説をつけた．はじめて読むときは，章末問題をスキップしてもよいが，再度読まれるときには，これにもチャレンジしていただきたい．本書を読む予備知識としては，大学教養程度の数学，解析力学，電磁気学を要求するにとどめ，あとは読んでわかるように説明を心がけた．本書だけで量子力学の勉強を完結できるよう心がけたつもりである．また，すでに量子力学を学んだ大学院生，研究者が復習するためのものとしても問題を通じて理解するこの方式は十分有益であろう．なお全章にわたって，$\hbar$，c は省略せず，いろいろな物理量の次元をはっきりさせておいた．

章末問題に取り上げた問題の一部は，量子力学の講義と並行して行われた学部3年生の量子力学演習より使用させていただいた．当時の演習を担当してくださった方々，とくに，東島 清博士，清水清孝博士，北沢良久博士，小川 格博士，出口哲生博士をはじめ多くの方々に感謝したい．なお，本書の出版をお勧めくださった牟田泰三教授にも厚く御礼を申し上げる．また宮沢弘成教授には，長年にわたって，量子力学，素粒子物理学の研究に関して，おおいに御教授いただいたことを心から

感謝申し上げる．

本書の刊行には終始，講談社サイエンティフィクの太田一平氏の一方ならぬお世話になった．また原稿の整理，校正に関し，椛山裕人氏など多くの方々のお世話になった．厚く御礼申し上げたい．

1994 年 1 月

猪木慶治
川合　光

目　　次

第 II 巻の目次

第1章　量子論の誕生

20 世紀の最初の四半世紀の間に，ミクロの世界に関するわれわれの理解は革命的な変革を遂げてきた．それは古典物理学の適用限界が明らかにされたのみではなく，量子力学というミクロの世界の物理を記述する一貫した理論が誕生したからである．量子力学の誕生は，1900 年に Planck がエネルギー量子というものを発見したときにはじまると考えてよい．19 世紀にも，Maxwell，Boltzmann らによってなされた古典物理学に基づく原子論の研究は，物質のいろいろな性質を説明するうえでかなりの成功を収めていた．しかし，ミクロの世界の現象についての知識が正確になるにつれて，古典物理学はいくつかの困難，矛盾にぶつかり，それらを説明するためにはまったく新しい原理が必要であることが明らかになってきた．第 1 章では，古典的概念の変更を余儀なくさせ，量子論の誕生を導いた実験のうち，主だったものをいくつか紹介しよう．

1.1　黒体輻射とエネルギー量子の発見：Planck

壁が温度 T の黒体でできている箱，つまり空洞を考える．いわゆる黒体輻射の問題である．いま，熱平衡状態において，空洞内での光のスペクトルは温度 T のみに依存し，壁の物質，空洞の形，または大きさには，いっさい関係しないことがわかっていた．

Planck 以前には，単位体積当たりのエネルギーのスペクトル分布 $U(\nu, T)$（ν は振動数）については，古典的概念に基づいてたがいに矛盾する説明がなされていた．1 つは，Rayleigh と Jeans によるもの(Rayleigh-Jeans の熱放射式)であり，振動数の小さい領域で実験事実を説明できた．もう 1 つは Wien の導いた経験式で，振動数が大きい領域でのみ実験と一致した．1900 年に Planck は，新しい定数 h を導入することでこれら 2 つの公式をつなぐつぎのような内挿公式を見い出した．

$$U(\nu, T)=\frac{8\pi h}{c^3}\frac{\nu^3}{e^{\frac{h\nu}{kT}}-1} \tag{1.1}$$

これが有名な Planck の公式で，k は Boltzmann 定数，c は光速であり h(≡Planck 定数)は実験との比較から $h=6.626\times10^{-27}$erg·sec と決められた．

Planck の公式は全エネルギー領域をカバーしており，他の 2 つの公式を極限の形として含んでいる(図1.1)．Planck は，こうして実験とよくあう公式をみつけたが，もしこれだけで満足していたら，彼の仕事は単なる幸運な思いつきにすぎなかったかもしれない．しかし，彼はこの公式のよってくる深い原因をつきとめることに日夜努力し，ついにつぎのような**エネルギー量子**という考えに到達した．

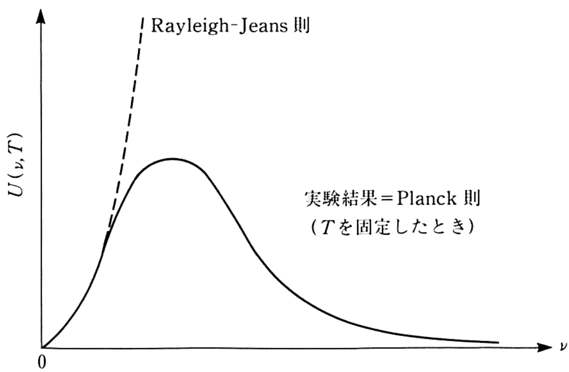


図 1.1　Rayleigh-Jeans 則と実験結果との比較

エネルギーは，いくらでも細かく分けうるような連続量ではなく，ν という振動数を有する輻射のエネルギーは，$h\nu$ という量の整数倍

$$E=nh\nu \qquad (n=0,1,2,\cdots) \tag{1.2}$$

の値だけしかとることができない．

振動数 ν の光は $h\nu$ のエネルギーのかたまりであるエネルギー量子からできているという仮説に基づいて，Planck の公式(1.1)を導くことに成功したのである．

例題 1　エネルギー量子仮説から Planck の公式(1.1)を導け．

解　Boltzmann の分布則より，温度 T の平衡状態においてエネルギー E の状態にある確率は，$e^{-\frac{E}{kT}}$ に比例する．Planck のエネルギー量子仮説(1.2)を用いて，エネルギーの平均値 $\langle E\rangle$ を求めると，

$$\langle E\rangle=\frac{\sum_{n=0}^{\infty} nh\nu e^{-\frac{nh\nu}{kT}}}{\sum_{n=0}^{\infty} e^{-\frac{nh\nu}{kT}}}$$

$$=\left.\frac{\sum_{n=0}^{\infty} nh\nu e^{-nh\nu x}}{\sum_{n=0}^{\infty} e^{-nh\nu x}}\right|_{x=\frac{1}{kT}} \tag{ⓐ}$$

となる．一方，

$$\sum_{n=0}^{\infty} e^{-nh\nu x}=\frac{1}{1-e^{-h\nu x}}=\frac{e^{h\nu x}}{e^{h\nu x}-1} \tag{ⓑ}$$

$$\sum_{n=0}^{\infty} nh\nu e^{-nh\nu x}=-\frac{d}{dx}\left(\sum_{n=0}^{\infty} e^{-nh\nu x}\right)=\frac{h\nu e^{h\nu x}}{(e^{h\nu x}-1)^2} \tag{ⓒ}$$

ⓑ，ⓒをⓐに代入すると，1 つの振動数 ν の状態について

$$\langle E\rangle=\left.\frac{h\nu}{e^{h\nu x}-1}\right|_{x=\frac{1}{kT}}=\frac{h\nu}{e^{\frac{h\nu}{kT}}-1} \tag{ⓓ}$$

となる．これに ν と $\nu+d\nu$ の間の振動数の状態の数をかけると $U(\nu,T)d\nu$ となり(1.1)が求まる．■

例題 2　橙色 ($\lambda=6000$ Å) の光の量子当たりのエネルギーを計算し，この色の 60 W の光源から 1 秒当たりに放出される光子の数を求めよ．

解　$\lambda=6000$ Å の光の量子当たりのエネルギーは，

$$h\nu=h\frac{c}{\lambda}=\frac{6.626\times10^{-27}\,\mathrm{erg\cdot sec}\times3\times10^{10}\,\mathrm{cm\cdot sec^{-1}}}{6000\times10^{-8}\,\mathrm{cm}}$$

$$\simeq3.3\times10^{-12}\,\mathrm{erg} \tag{ⓐ}$$

ゆえに，1 秒当たり，60 W の光源から放出される光子の数は，

$$\frac{6\times10^{8}\,\mathrm{erg}}{3.3\times10^{-12}\,\mathrm{erg}} \tag{ⓑ}$$

$$=1.81 \times 10^{20} \text{ 個} \qquad ⓒ$$

となる. ∎

このように，たくさんの光子が放出されているので，光の粒子性を直接観測できなくても何ら不思議ではない．それにもかかわらず，Planck の公式の解釈はその後の輻射の描像を革命的に変えたわけである．

[問題 1] 宇宙の創生に関するビッグ・バン理論によれば，宇宙初期に作られた強い輻射場は現在も宇宙全体にひろがる黒体輻射として残っていると予想されている．1965 年に Penzias と Wilson は，この宇宙背景輻射の温度が約 2.7 K であることを発見した．この温度で背景輻射が最も強くなる波長を求めよ．

[解] Planck の公式(1.1)で $T=2.7\,\mathrm{K}$ と固定すると $U(\nu, T=2.7\,\mathrm{K})$ は図 1.1 に示すように，ある ν の値(あるいは，ある λ の値)で最大となる．その波長 λ は約 0.1 cm となることがわかる． ∎

1.2　光電効果：Einstein

Planck の仮説の革命的意義は，発表当時すぐに一般に受け入れられたわけではない．しかしながら一連の実験事実のすべてによって確認されていった．その重要な第一歩が，1905 年，Einstein によって行われた**光電効果**の説明である．

すなわち，金属のような物質の表面に紫外線や X 線を当てると電子が飛び出すという光電効果の性質をくわしく調べると，従来の古典物理学の考え方では理解できないことがいろいろとでてきた．たとえば，

1. 飛び出す電子ひとつひとつのエネルギーを測ってみると，照射する光の強さにはよらず，振動数 ν のみに依存する
2. 飛び出す電子の個数は，照射する光の強さに比例する

というような 2 つの性質は，古典的な波動説とは矛盾する．Einstein は Planck の量子仮説をさらに押し進め，

振動数 ν の光は $h\nu$ のエネルギーをもつ粒子(つまり**光子**)の集団のようにふるまう

と考え，光電効果の性質を見事に説明した．電子が光のエネルギーを吸収するときは，1 個の光子が 1 個の電子に吸収されるとし，金属内の自由電子が金属表面を飛び出すときに必要な仕事（仕事関数）を W とすると飛び出す電子の運動エネルギーは，

$$\frac{1}{2}mv^2 = h\nu - W \tag{1.3}$$

となる(ただし，v は電子が飛び出すときの最大速度)．(1.3)の関係はきわめて簡単であるが，さきに述べた実験事実 1，2 を説明する．これこそ光の粒子性を最も簡単明瞭に示すたいせつな関係式であり，振動数が ν の光は 1 個のエネルギーが $h\nu$ の光子の集まりであると考えてよいことが明らかとなった．

[問題 2]　電子が原子から離れる際には，束縛エネルギー W(仕事関数)の仕事をしなければならない．ナトリウム原子の場合の W は 2.3 eV である．いま，1900 Å の紫外線をこのナトリウム金属表面に照射したとき，飛び出す電子の最大運動エネルギーを求めよ．

[解]　1900 Å の入射光子のエネルギーは，

$$h\nu=\frac{hc}{\lambda}=\frac{2\pi\hbar c}{\lambda}=\frac{2\pi\times1.97\times10^{3}\ \mathrm{eV\cdot Å}}{1900\ \mathrm{Å}}$$

$$=6.51\ \mathrm{eV}$$

∴　飛び出す電子の最大運動エネルギーは，

$$\frac{1}{2}mv^2=h\nu-W=6.51\ \mathrm{eV}-2.3\ \mathrm{eV}=4.21\mathrm{eV}$$ ∎

1.3　Compton 効果：Compton

光の粒子性を最も顕著に示す証拠は，いわゆる **Compton 効果**であろう．1923 年，Compton は単色の X 線を物質に当てたとき，古典電磁気学では理解できないような散乱があることを見い出した．すなわち，照射した X 線より波長の長い X 線があることを発見したのである．彼は入射 X 線よりも波長の長い散乱についての実験をきわめて精密に行い，波長のずれ $\varDelta\lambda$ は曲げられた角度だけで決まり，入射 X 線の波長や散乱物質には無関係に，

$$\varDelta\lambda=0.0243(1-\cos\theta)\ \mathrm{Å} \tag{1.4}$$

となる結論を得た．これを **Compton 散乱**という．

Compton は，光子をエネルギー $h\nu$，運動量 $\dfrac{h\nu}{c}$ をもつ粒子と考え，それが静止した 1 個の電子と衝突して，光子は角度 θ の方向にエネルギー $h\nu'$，運動量 $\dfrac{h\nu'}{c}$ で進み，その間，エネルギーと運動量の保存則が成り立つとして実験結果(1.4)を導いた．

例題　エネルギーと運動量の保存則を相対論的に考えて，

$$\varDelta\lambda=\lambda'-\lambda=\frac{h}{m_e c}(1-\cos\theta) \qquad ①$$

を導き，$\dfrac{h}{m_e c}$ (**Compton 波長**)の値を求めて(1.4)と比較せよ．

解

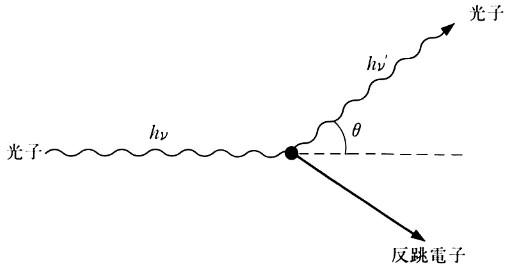


図1.2

運動量 $\boldsymbol{p}$ の入射光子が静止している電子(質量 m_e)と衝突したとき，散乱光子の運動量を $\boldsymbol{p}'$，反跳された電子の運動量を $\boldsymbol{P}$ としよう(図1.2).

運動量の保存則から

$$\boldsymbol{p}=\boldsymbol{p}'+\boldsymbol{P} \qquad ⓐ$$

エネルギーの保存則から

$$h\nu+m_ec^2=h\nu'+(m_e^2c^4+P^2c^2)^{\frac{1}{2}} \qquad ⓑ$$

ⓐより，

$$P^2=\left(\frac{h\nu}{c}\right)^2+\left(\frac{h\nu'}{c}\right)^2-2\frac{h\nu}{c}\frac{h\nu'}{c}\cos\theta$$

$$\therefore\quad P^2c^2=(h\nu-h\nu')^2+2(h\nu)(h\nu')(1-\cos\theta) \qquad ⓒ$$

一方，ⓑより，

$$m_e^2c^4+P^2c^2=(h\nu-h\nu')^2+2m_ec^2(h\nu-h\nu')+m_e^2c^4 \qquad ⓓ$$

ⓓからⓒをひくと，

$$h^2\nu\nu'(1-\cos\theta)=hm_ec^2(\nu-\nu')$$

$$\therefore\quad \frac{h}{m_ec}(1-\cos\theta)=c\frac{\nu-\nu'}{\nu\nu'}=c\left(\frac{1}{\nu'}-\frac{1}{\nu}\right)$$

$$=\lambda'-\lambda=\varDelta\lambda \qquad ⓔ$$

$$\text{Compton 波長}\quad \frac{h}{m_ec}=\frac{2\pi\hbar c}{m_ec^2}=\frac{2\pi\times197\ \text{MeV}\cdot\text{fm}^{1)}}{0.511\ \text{MeV}}$$

$$\simeq0.0243\ \text{Å}$$

ゆえに，(1.4)が導けた.　▮

このようにして，(1.4)はEinsteinの粒子説によってきわめて簡単に説明できる．この現象を**Compton効果**という．これにより，光は光子として存在し，エネルギーだけでなく運動量も(粒子のように)もっていることが明らかになった.

1)　$\text{fm}=10^{-15}\text{m}=10^{-13}\text{cm}$

[問題 3] 波長 0.5 Å の X 線が 90° の方向に Compton 散乱されるとき，つぎのものを求めよ．

(1) 波長のずれ

(2) 散乱 X 線の波長

(3) 反跳電子に与えられる運動エネルギー

(4) 入射光子が衝突中に失うエネルギーの割合

[解] (1) 波長のずれ $\Delta\lambda$ は例題の①で $\theta=90°$ として，

$$\Delta\lambda=\frac{h}{m_e c}(1-\cos 90°)=0.0243\ \text{Å}$$

結果は，入射 X 線の波長にはよらないことに注意．

(2) 例題の①より，

$$\lambda'=\lambda+\Delta\lambda=0.5\ \text{Å}+0.0243\ \text{Å}=0.5243\ \text{Å}$$

(3) 反跳電子に与えられる運動エネルギーを K とすると

$$h\nu+m_e c^2=h\nu'+m_e c^2+K$$

$$\therefore\quad K=h(\nu-\nu')=h\left(\frac{c}{\lambda}-\frac{c}{\lambda'}\right)=h\left(\frac{c}{\lambda}-\frac{c}{\lambda+\Delta\lambda}\right)$$

$$=\frac{hc\Delta\lambda}{\lambda(\lambda+\Delta\lambda)}=\frac{2\pi\times 1.97\ \text{keV}\cdot\text{Å}\times 0.0243\ \text{Å}}{0.5\ \text{Å}(0.5243\ \text{Å})}=1.15\ \text{keV}$$

(4) $(\text{入射 X 線のエネルギー})=h\nu=\dfrac{hc}{\lambda}=\dfrac{(2\pi)1.97\ \text{keV}\cdot\text{Å}}{0.5\ \text{Å}}$

$$=24.8\ \text{keV}$$

光子の失うエネルギー$\simeq$反跳電子に与えられる運動エネルギー$\simeq$1.15 keV.

∴ 入射光子が衝突中に失うエネルギーの割合は，

$$\frac{1.15\ \text{keV}}{24.8\ \text{keV}}\times 100\ \%=4.64\ \%$$ ∎

1.4 粒子性と波動性

1.1 から 1.3 節で光を粒子と考えなくてはつごうの悪いようないろいろの現象を述べてきた．これは光の波動論を否定するものであろうか．答は〝否〟であろう．たとえば，光の干渉とか回折のような現象は，純粋な粒子論では説明できない．

たとえば，Young の二重スリットの実験を思いだしてみよう．図 1.3 に示すように，スリット S_1, S_2 を同時にあけたときの写真は，(a)のように 2 つの写真を二重焼きにしたようなものではなく，(b)のように本質的に別の模様が得られる．この著しい干渉の事実は光を波と考えることによって，とくに不自然な仮定を導入すること

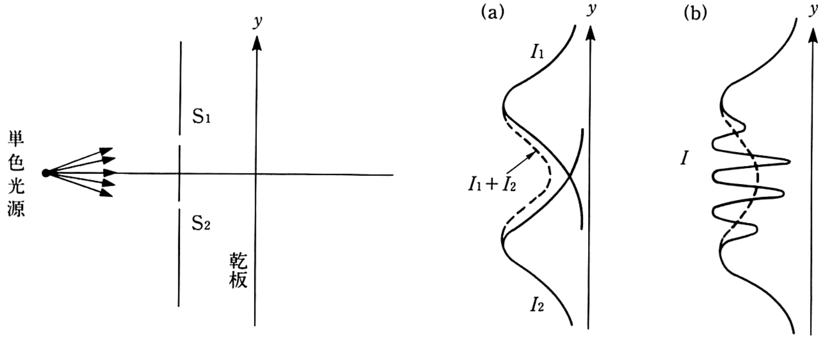


図1.3　Youngの二重スリットの実験

(a) $I=I_1+I_2$．2つの写真の二重焼き．I_1 (I_2) はS_1 (S_2) のスリットのみをあけたときの強度　(b) 2つのスリット S_1，S_2を両方あけたときの強度．$I \neq I_1+I_2$

なく説明できる．これはちょうど，光の波動説が光電効果を説明できないのと同様に，粒子説は光の干渉の事実を説明するのにまったく無力である．

こうして，光というものは粒子と波動という二重人格をもつことになる．しかしながら，われわれが従来もっていた波という概念と粒子という概念とは，ひとつのものがそのどちらでもあるということなど許すものではなく，大きなパラドックスとなった．にもかかわらず，この二重性こそ，光の本質的なふるまいであり，このパラドックスは，その後，電磁場の量子化によって完全に解決されることになった(第14章参照)．

1.5　de Broglie仮説とDavisson-Germerの実験：de Broglie

1923年，de Broglieはつぎのような仮説を提出した．すなわち，これまで述べてきたような光のもつ波動─粒子の二重性は，ミクロな対象のもつ一般的な性質であり，いままで粒子と考えられていた電子のようなものでも，光と同じように粒子─波動の二重の姿をみせるのではないかと考え，物質粒子にともなう波(物質波)も光の場合と同じ関係式が成り立つと仮定した．

光子の場合，エネルギーと運動量の大きさは，

$$E=h\nu, \qquad p=\frac{h\nu}{c}=\frac{h}{\lambda} \tag{1.5}$$

で与えられることがEinsteinによって示されていた．光の波長をλとすれば，

$$\lambda=\frac{h}{p} \tag{1.6}$$

と書くこともできる. de Broglie は, 物質粒子に対しても (1.6) の関係がそのまま成立すると考えた. そこでこれを **de Broglie の関係式**という.

例題 光速よりもずっと遅い自由電子のエネルギーと運動量の関係は,

$$E=\frac{p^2}{2m_e} \quad ①$$

で与えられる. いま, 電子を V ボルトの電圧で加速したときの電子の de Broglie の波長を求めよ.

解 もし, 電子を V ボルトの電圧で加速すれば, 電子の得る運動エネルギーは,

$$E=\frac{p^2}{2m_e}=eV \quad ⓐ$$

$$\therefore \quad p=\sqrt{2m_e eV} \quad ⓑ$$

(1.6) から電子の de Broglie 波長は,

$$\lambda=\frac{h}{p}=\frac{hc}{\sqrt{2m_e c^2 eV}}=\frac{2\pi\hbar c}{\sqrt{2m_e c^2 eV}} \quad ⓒ$$

となる. m_e と e に数値を代入すれば,

$$\lambda=\frac{(2\pi)\times 1.97\times 10^3\ \mathrm{eV\cdot Å}}{\sqrt{2\times 0.511\times 10^6\ \mathrm{eV}\times V\cdot \mathrm{eV}}}=\frac{12.3}{\sqrt{V}}\ \mathrm{Å} \quad ⓓ$$

100 ボルト程度なら, 電子波の波長は 1 Å の程度になる. この程度の波長ならば, X 線と同様に結晶内に正しく並んだ原子によって回折現象を起こすはずである. ▮

de Broglie の仕事はとても人々の注意をひき, 多くの人々は電子の回折現象を観測することによって確かめられるだろうと考えた. 実際, Davisson と Germer は電子線を結晶に当てると, ちょうど $\lambda=\frac{h}{p}$ の波長の波を当てたときと同じ回折現象が現れることを確かめた (1927). さらに G.P.Thomson や菊池正士も電子の波動性を示す本格的な実験を行った. このように, 電子の波動性が確かめられたことは, 波動力学の発展への重要なステップとなった. さらに,

ミクロな対象のもつ一般的性質として, 電子のみでなく中性子などの物質粒子も, 光と同じように粒子一波動の二重性をもつ.

ことが明らかになった.

[問題 4] つぎの各場合の物質波の波長を求めよ.

(1) 速度 $10^5\ \mathrm{cm\cdot sec^{-1}}$ で飛んでいる 1 μg の磁気単極子

(2) 速度 $10^8\ \mathrm{cm\cdot sec^{-1}}$ で動いている金属中の自由電子

(3) $T \simeq 300$ K の熱中性子

(4) 1 GeV の電子

[解] (1) $\lambda = \dfrac{h}{p} = \dfrac{h}{mv} = \dfrac{6.63\times10^{-27}\,\text{erg}\cdot\text{sec}}{10^5\,\text{cm}\cdot\text{sec}^{-1}\cdot10^{-6}\text{g}}$

$= 6.63\times10^{-26}$ cm

(2) $\lambda = \dfrac{h}{p} = \dfrac{2\pi\hbar c}{m_e vc} = \dfrac{2\pi\hbar c}{m_e c^2 \dfrac{v}{c}}$

$= \dfrac{2\pi\times197\,\text{MeV}\cdot\text{fm}}{0.511\,\text{MeV}\times(300)^{-1}}$

$= 7.27\times10^5$ fm $= 7.27$ Å

(3) $\dfrac{p^2}{2m_n} \simeq \dfrac{3}{2}kT$

$\therefore\quad \lambda = \dfrac{h}{p} = \dfrac{h}{\sqrt{3m_n kT}}$

$m_n = 939.6\,\text{MeV}\cdot c^{-2}$, $k = 8.62\times10^{-5}$ keV·K^{-1} $= 8.62\times10^{-11}$ MeV·K^{-1}

$T = 300$ K を代入すると,

$\lambda = \dfrac{2\pi\hbar c}{\sqrt{3m_n c^2 kT}} = \dfrac{(2\pi)197\,\text{MeV}\cdot\text{fm}}{\sqrt{3\times939.6\,\text{MeV}\times8.62\times10^{-11}\,\text{MeV}\cdot\text{K}^{-1}\times300\,\text{K}}}$

$= 1.45$ Å

(4) この場合, いままでのように非相対論的近似で p を求めるのはよくない. しかし, (1.5)は相対論的領域でも成り立つ.

$$E = \sqrt{p^2c^2 + m_e^2c^4}$$

$E \sim 1$ GeV のとき $m_e c^2$ は E に比べてはるかに小さい.

$$\therefore\quad \lambda = \frac{h}{p} = \frac{hc}{E} = \frac{2\pi\hbar c}{E} = \frac{(2\pi)(197)\text{MeV}\cdot\text{fm}}{1000\,\text{MeV}} = 1.24\,\text{fm}$$ ∎

[問題 5] 大きさ 1 fm 程度の原子核の構造を (1) γ 線, (2) 電子線, (3) 陽子線を用いて調べるのに, どの程度のエネルギーが必要か.

[解] 大きさ 1 fm 程度の原子核の構造を調べるには, 波長 $\lambda \sim a = 1$ fm の波を用いればよい. 対応する粒子の運動量は $p = \dfrac{h}{\lambda} = \dfrac{h}{a}$ で与えられる. エネルギーと運動量の関係式としては, 相対論的な関係式 $E(p) = \sqrt{p^2c^2 + m^2c^4}$ を用い, 静止エネルギー mc^2 を引いた値を求める.

(1) γ 線；$E=pc\simeq\dfrac{hc}{a}=\dfrac{2\pi\times197\,\mathrm{MeV\cdot fm}}{1\,\mathrm{fm}}$

$$=1.24\times10^3\,\mathrm{MeV}$$

(2) 電子線；$E(p)-m_\mathrm{e}c^2=\sqrt{p^2c^2+m_\mathrm{e}{}^2c^4}-m_\mathrm{e}c^2\simeq pc=1.24\times10^3\,\mathrm{Mev}$

(3) 陽子線；$\sqrt{p^2c^2+m_\mathrm{p}{}^2c^4}-m_\mathrm{p}c^2=\sqrt{(1240)^2+(938)^2}\,\mathrm{MeV}-938\,\mathrm{MeV}$

$$=617\,\mathrm{MeV}$$ ∎

1.6 原子スペクトルの量子化：Bohr

古典物理で理解することのできない現象は，原子スペクトルの実験にも現れた．

原子スペクトルの離散性

正電荷をもつ重い原子核のまわりを電子がまわっているという長岡-Rutherfordの原子模型[1]によって，原子による α 粒子の散乱は定量的に説明されたが，同時につぎのような困難にも直面した．原子核のまわりをまわっている電子は絶えず加速されているので，古典電磁気学により，その電子はエネルギーをしだいに失い短い時間(10^{-12} 秒程度)の間に原子核に落ちこんで原子が不安定になってしまう(章末問題[2]参照)．第 2 の困難は，この模型で原子から射出される光のスペクトルに関するものである．上に述べたようなからくりで，電子の軌道半径が小さくなると，それにつれて電子の運動周期も減少し，射出される光の振動数 ν は連続的に変化するはずである．ところが，これは実験と矛盾する．

1885 年，スイスの中学校の教師であった Balmer は，水素原子からの可視光のスペクトル線の間につぎのような驚くべき関係式を発見した(これを Balmer 系列という)．それを Rydberg が少し書きかえた形がつぎの公式である．

$$\nu=Rc\left(\frac{1}{2^2}-\frac{1}{n^2}\right)\qquad(n=3,4,\cdots)\tag{1.7}$$

この R は Rydberg 定数といわれ実測値は 109,737cm^{-1} である．これはエネルギーの次元では $Rch=13.61\mathrm{eV}$ である．そのほかに発見されたものとしては，

$$\text{Lyman 系列：}\nu=Rc\left(\frac{1}{1^2}-\frac{1}{n^2}\right)\qquad(n=2,3,\cdots)\tag{1.8}$$

$$\text{Paschen 系列：}\nu=Rc\left(\frac{1}{3^2}-\frac{1}{n^2}\right)\qquad(n=4,5,\cdots)\tag{1.9}$$

$$\text{Blackett 系列：}\nu=Rc\left(\frac{1}{4^2}-\frac{1}{n^2}\right)\qquad(n=5,6,\cdots)\tag{1.10}$$

1) 長岡-Rutherford の原子模型や，それ以前に提唱された Thomson の原子模型の詳細については，朝永振一郎，量子力学 I，第 3 章 §16，みすず書房(1969)を参照されたい．

$$\text{Pfund 系列}：\nu=Rc\left(\frac{1}{5^2}-\frac{1}{n^2}\right)\qquad(n=6,7,\cdots)\tag{1.11}$$

などがある．これらは，古典的な理論ではとても理解できない．

原子のエネルギー準位の量子化

これら2つの困難を克服するために，1913年，Bohrは原子のエネルギーも，いくつかのとびとびの値だけが許されるのではなかろうかと考え，つぎの2つの仮説を導入した．

仮説1：電子の占める円軌道の角運動量は，$n\hbar\,(n=1,2,3,\cdots)$という条件をみたすとびとびの値のみが許されると仮定する．そうすると，この軌道に対するエネルギー準位E_nを計算することができる．さらに，電子がある許されたエネルギーの状態にある間は光は放出されないと仮定し，この状態をBohrは定常状態と名づけた．

仮説2：電子があるエネルギーE_nという定常状態にあり，これが何かのひょうしでE_mという定常状態に飛び移ったとき，$h\nu=E_n-E_m$という関係で与えられる光子$h\nu$が放出されると仮定する．そうすると，このとき出る光はつぎの振動数をもっていることになる．

$$\nu=\frac{E_n-E_m}{h}\tag{1.12}$$

仮説1から，水素原子の円軌道の場合には，

$$E_n=-\frac{m_e e^4}{2\hbar^2}\frac{1}{n^2}\tag{1.13}$$

というエネルギー準位が導かれる．仮説2より，放出される光子のエネルギー$h\nu$は，

$$h\nu=E_n-E_m\tag{1.14}$$

となり，

$$\nu=\frac{m_e e^4}{4\pi\hbar^3}\left(\frac{1}{m^2}-\frac{1}{n^2}\right)\tag{1.15}$$

が得られる．$m=2$の場合，Balmer系列が得られ，Rydberg定数を既知の量m_e, e, cで表して計算することができた．同様にして他の系列も全部得られる．もしも原子が$n=1$の状態(基底状態)にあるならば，光子を放出することはできず，原子は安定に保たれる．

Bohrの仮説が発表されてすぐ，FranckとHertzは，この仮説による不連続なエネルギー準位を直接に確認する実験を企てた．アイデアはつぎのようである．いま，あるエネルギーの電子を水銀のガスに衝突させてみよう．通常の温度では，ガスの原子は基底状態E_1にあると考えられる．$E_1, E_2, E_3, \cdots$を原子の量子化されたエネ

ルギー準位とし，E を入射電子の運動エネルギーとする．$E<E_2-E_1$ のときには，電子がガスの原子に衝突しても，もっているエネルギーが足りないので原子を E_2 の状態までもちあげることはできず，衝突はすべて弾性的である．$E>E_2-E_1$ になると，E_2-E_1 だけエネルギーを失う非弾性衝突が起こり，その際，原子は最初の励起状態 E_2 にもちあげられ，$E-(E_2-E_1)$ の小さいエネルギーをもった電子が観測されるはずである．このことが，ぴったりと実験で確かめられ，$E_2, E_3, E_4, \cdots$ が，実際の原子の不連続なエネルギー準位にほかならないことが示された．

以上，1.1 から 1.6 節に述べてきたように，ミクロの世界を記述するには，古典物理学とは異なるまったく新しい物理を必要とすることが明らかになってきた．

第1章　章　末　問　題

［1］ テレビ局の送信機が 193.25 MHz の振動数の電波を 50 kW で放射しているとする．

(1) 放射された各光子のエネルギーはいくらか(eV 単位)．

(2) 電磁波の振動の1周期の間に放射される光子数を求めよ．

［解］ (1) 振動数 $\nu=193.25\times10^6\ \mathrm{sec}^{-1}$ であるから，

$$\text{光子のエネルギー}\ h\nu=\hbar\omega=\hbar c\frac{\omega}{c}$$

$$=1.97\times10^3\ \mathrm{eV\cdot\mathring{A}}\ \frac{2\pi\times193.25\times10^6\ \mathrm{sec}^{-1}}{3\times10^{10}\ \mathrm{cm\cdot sec}^{-1}}$$

$$=7.98\times10^{-7}\ \mathrm{eV}$$

(2) $50\ \mathrm{kW}=5\times10^{11}\ \mathrm{erg\cdot sec}^{-1}=3.12\times10^{23}\ \mathrm{eV\cdot sec}^{-1}$

1秒間に 193.25×10^6 周期があるから，

$$1\text{周期の間に放射される光子数}=\frac{3.12\times10^{23}\ \mathrm{eV\cdot sec}^{-1}}{(7.98\times10^{-7}\ \mathrm{eV})\times(193.25\times10^6\ \mathrm{sec}^{-1})}$$

$$=2.01\times10^{21}\ \text{個}$$

［2］ 水素原子について Rutherford 模型を仮定しよう．水素の半径として Bohr 半径をとる．古典電磁気学によれば，加速度運動をする電子は電磁波を放出する．このように考えたとき，水素原子の寿命を求めよ．

［解］ 古典電磁気学を用いて計算すると，加速度運動をする電子の放出するエネルギーは，単位時間当たり

$$S=\frac{2}{3}\frac{e^2}{c^3}|\dot{\boldsymbol{v}}|^2 \qquad ⓐ$$

半径 r の円運動における加速度 $\dot{v}$ は，

$$m|\dot{\boldsymbol{v}}|=\frac{e^2}{r^2} \tag{ⓑ}$$

この $|\dot{v}|$ をⓐに代入すると，単位時間に電磁波を射出して原子から失われるエネルギーは，

$$\frac{dW}{dt}=-\frac{2}{3}\frac{e^6}{m^2c^3r^4} \tag{ⓒ}$$

一方，円運動において電子のエネルギーは，

$$W=-\frac{e^2}{2r} \tag{ⓓ}$$

である．ⓒ，ⓓより，

$$\frac{dr}{dt}=-\frac{4}{3}\frac{e^4}{m^2c^3r^2} \tag{ⓔ}$$

∴　r が $r=a_0=$Bohr 半径から $r=0$ になるまでの時間 τ は，

$$\tau=\frac{1}{4}\left(\frac{a_0mc^2}{e^2}\right)^2\frac{a_0}{c} \tag{ⓕ}$$

$a_0=0.53\times10^{-8}$ cm を代入すると，

$$\tau=1.6\times10^{-11}\ \mathrm{sec}$$

となる．

第2章　Schrödingerの波動方程式

第1章で述べたように，ミクロの世界に適用できる理論をつくるためには，基本的な古典的概念および法則は根本的に変更されねばならないことがわかってきた．そこで頭を柔軟にして新しい考え方に慣れる努力をしていただきたい．原子のようなミクロな対象は，粒子一波動の二重性という性質をもつことがわかってきたので，粒子を波動の重ね合わせとしての波束という描像で表して，基礎方程式である Schrödinger 方程式を推測してゆく(2.1 節，2.2 節)．不確定性原理というのも，あまりはっきりしない原理であり，古典力学のふつうの描像を否定するという消極的内容をもっている．もちろん不確定性原理だけでは，それに基づいて新しい力学を組み立てるには不十分であり，なにか積極的な主張が存在しなければならない．しかし，一度にわかろうとせずに，もっと慣れてから，もう一度復習することをおすすめする．2.3 節では，波動関数の意味を調べ，Born の確率解釈という考え方を解説する．これによって，波動関数がわかれば，位置，運動量，運動エネルギーといった物理量を観測と比較することができるようになる(2.4 節，2.5 節)．2.7 節では古典力学との関係を示す Ehrenfest の定理を紹介する．いずれにしても，本章では物理的概念の把握に努めていただきたい．

2.1　重ね合わせの原理と波束

結論からさきにいえば，第1章で述べてきた現象は，いわゆる量子力学あるいは波動力学を使えばすべて理解できる．そのために基礎方程式である Schrödinger 方程式から入っていくことにしよう．しかし，量子力学は古典力学の適用限界の範囲外にあるので，この方程式を古典力学から演繹的に導きだすことはできない．第1章で，光も電子も，粒子と波動の二重性をもつことを述べてきたが，いま，電子を例にとり，電子の波動性と粒子性をどのように両立させることができるかを出発点として Schrödinger 方程式を推測していこう．もちろん，新しい理論は古典力学をその極限の場合として含み，また同時にこの極限の場合をそれじしんの基礎づけのために必要とする．

波束としての粒子

第1章の1.2節でミクロな対象は，粒子―波動の二重性という一般的性質をもっていることを強調した．そこで，粒子と波動の両方の性格をもったものの模型を考えよう．波動のふるまいを粒子的描像からつくるのは難しいが，粒子的ふるまいを波動的描像からつくることは可能である．第1章1.4節で，Young の二重スリットの実験(図1.3)における干渉は2つの波の重ね合わせで説明できることがわかった．de Broglie 波に対しても重ね合わせの原理が成立するものと仮定する．重ね合わせの原理とは，波として ψ_1 というものが可能であり，ψ_2 という波も可能であるならば $\psi=c_1\psi_1+c_2\psi_2$ で表されるような波もまた可能であることを意味する．ここで c_1, c_2 は時間によらない任意の複素数である．これはいいかえれば，de Broglie 波のみたすべき波動方程式が線型であることを要求する．すなわち，量子力学での基本方程式をさがしてゆくうえでの指導原理として，この重ね合わせの原理を採用することにしよう．粒子に小さなひろがりをもつ波動を結びつける必要があるので，空間のある限られた領域にだけ局在している波を考える．

たとえば，電子波源をシャッターつきの小窓をあけた箱のなかに入れておき，ある瞬間シャッターを開き，その後それを閉じたとする．そうすると，シャッターを閉じたあと，ある限られた範囲にだけ波が存在している．そして波の存在する部分は時間がたつにつれて遠ざかっていく．このような波のかたまりを波束とよぶが，その波束は，重ね合わせの原理を使って，異なった波数 k をもった平面波 $e^{i(kx-\omega t)}$ をある重みをかけて重ね合わせると小さい空間内でのみ波がおたがいに強めあい，その外では干渉で消えるように作ることができる．

簡単のために問題を1次元の場合に限り x 方向に進む波束を考えよう．われわれ

の求める解を $\psi(x,t)$ とすると上の一般論から，これは重み $g(k)$ を使って，

$$\psi(x,t)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty}g(k)e^{ikx-i\omega(k)t}dk \tag{2.1}$$

の形に書けるはずである．(2.1) において $t=0$ とおくと，

$$\psi(x,0)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty}g(k)e^{ikx}dk \tag{2.2}$$

となり，Fourier の逆変換を使って，

$$g(k)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty}\psi(x,0)e^{-ikx}dx \tag{2.3}$$

が得られる．したがって $t=0$ で $\psi(x,0)$ を与えると $g(k)$ が求まるから，これを (2.1) に代入して，任意の時刻 t におけるわれわれの波束の形が得られることになる．空間のある部分だけに局在する波として，計算に便利なものとして，

$$\psi(x,0)=A\exp(ik_0x)\exp\left(-\frac{x^2}{2\varDelta^2}\right) \tag{2.4}$$

の形のものをとろう．(2.4) より $|\psi(x,0)|^2$ は図 2.1 (a) に示すように，$x=0$ に極大をもっており $x=\pm\varDelta$ で $1/e$ に減少する．したがって (2.4) の波は，だいたいにおいて原点に局在する波束と考えてよい．(2.4) の $\psi(x,0)$ を (2.3) に代入すると，

$$g(k)=\frac{A}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty}\exp\left(-\frac{x^2}{2\varDelta^2}\right)\exp[-i(k-k_0)x]dx \tag{2.5}$$

となる．(2.5) の被積分量をつぎの形

$$\exp\left[-\frac{1}{2\varDelta^2}\{x-i\varDelta^2(k_0-k)\}^2\right]\cdot\exp\left\{-\frac{\varDelta^2}{2}(k_0-k)^2\right\}$$

に変形し，積分変数として x の代わりに，

$$z=\frac{1}{\sqrt{2}\,\varDelta}\{x-i\varDelta^2(k_0-k)\}$$

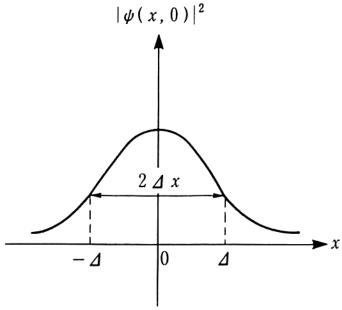
を用いて，これらを (2.5) に代入すると，

$$g(k)=\frac{\sqrt{2}\,A\varDelta}{\sqrt{2\pi}}\exp\left\{-\frac{\varDelta^2}{2}(k_0-k)^2\right\}\int_{-\infty-i\frac{\varDelta}{\sqrt{2}}(k_0-k)}^{+\infty-i\frac{\varDelta}{\sqrt{2}}(k_0-k)}\exp(-z^2)dz \tag{2.6}$$

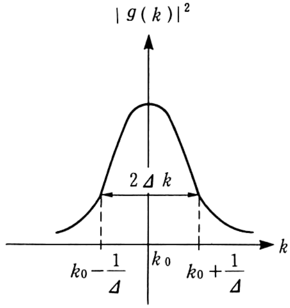
を得るが積分路を変形すれば (2.6) の積分は $\int_{-\infty}^{\infty}\exp(-z^2)dz$ となり，この定積分の値は $\sqrt{\pi}$ となる．けっきょく，

$$g(k)=A\varDelta\exp\left\{-\frac{\varDelta^2}{2}(k_0-k)^2\right\} \tag{2.7}$$

を得る．すなわち $|g(k)|^2$ は図 2.1 (b) に示すように $k=k_0$ において極大であり，$k=k_0\pm1/\varDelta$ で $1/e$ に減少する．したがってわれわれの波束は k_0 のまわりに $1/\varDelta$ 程度の



(a) $|\psi(x,0)|^2=|A|^2\exp\left(-\frac{x^2}{\Delta^2}\right)$



(b) $|g(k)|^2=|A|^2\Delta^2\exp\left\{-\Delta^2(k_0-k)^2\right\}$

図 2.1　波束のグラフ

重みをもって平面波を重ね合わせて得られたものといってよい．

波束の時間発展と波動方程式

(2.7)のように $g(k)$ が得られたから，これを(2.1)に代入すると任意の時刻 t におけるわれわれの波束が求められる．

さてちょっと，横道にそれて真空中における光波の伝播を考えてみよう．この場合には，角振動数 $\omega=2\pi\nu$（ν は振動数），波長 $\lambda=\dfrac{2\pi}{k}$，$\nu=\dfrac{c}{\lambda}$ という関係が成り立つので，$\omega=kc$ となる．したがって，

$$e^{ikx-i\omega t}=e^{ik(x-ct)} \tag{2.8}$$

$$\psi(x,t)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty}g(k)e^{ik(x-ct)}dk=\psi(x-ct) \tag{2.9}$$

となり $x-ct=0$ のまわりに局在する．つまり光波の波束は，そのままの形を保ったまま光速 c で伝播する．しかし，われわれは粒子を記述する波束をさがしているので，$\omega=kc$ を要求しない．一般には ω は k の関数 $\omega(k)$ である．そこで $\psi(x,t)$ が自由に運動している古典粒子を表すと要求して $\omega(k)$ を決めてやろう．

まず，計算を容易にする便宜上，$k\simeq k_0$ のまわりに鋭く局在している波束を考える．これは(2.7)で Δ が大きい場合に対応する．そこで $\omega(k)$ を k_0 のまわりに展開し，k の関数としてあまり急速に変化することはないと仮定すると，

$$\omega(k)\simeq\omega(k_0)+(k-k_0)\left(\frac{d\omega}{dk}\right)_{k_0}+\frac{1}{2}(k-k_0)^2\left(\frac{d^2\omega}{dk^2}\right)_{k_0} \tag{2.10}$$

と書ける．ここで(2.7)の $g(k)$ と(2.10)を(2.1)に代入し，$k-k_0=k'$ とおくと，

$$\psi(x,t)=A\exp[i\{k_0x-\omega(k_0)t\}]\left(\frac{1}{1+\frac{2i\xi}{\Delta^2}t}\right)^{\frac{1}{2}}\exp\left\{-\frac{(x-v_gt)^2}{2\Delta^2\left(1+\frac{2i\xi}{\Delta^2}t\right)}\right\} \tag{2.11}$$

が得られる．

ただし，$v_g\equiv\left(\frac{d\omega}{dk}\right)_{k_0}$ ，$\frac{1}{2}\left(\frac{d^2\omega}{dk^2}\right)_{k_0}\equiv\xi$

と定義した．

例題 1 (2.11) を導け．

解 (2.7)，(2.10) を (2.1) に代入し，$k-k_0=k'$ とおくと，

$$\psi(x,t)=\frac{A\Delta}{\sqrt{2\pi}}\exp[i\{k_0x-\omega(k_0)t\}]\int_{-\infty}^{\infty}\exp\left\{-\frac{\Delta^2}{2}k'^2\right\}$$
$$\times\exp\left\{-\frac{i}{2}k'^2\left(\frac{d^2\omega}{dk^2}\right)_{k_0}t\right\}\exp\left[ik'\left\{x-\left(\frac{d\omega}{dk}\right)_{k_0}t\right\}\right]dk' \tag{ⓐ}$$

が得られる．古典粒子の速度に対応するものは，上の波束の重心の動く速度であると考えなければならない．この波のかたまりとして波束の動く速さを群速度 v_g とよぶと，ⓐより，

$$v_g=\left(\frac{d\omega}{dk}\right)_{k_0}$$

であることがわかる．ⓐにおいて，

$$\frac{1}{2}\left(\frac{d^2\omega}{dk^2}\right)_{k_0}=\xi$$

を使うと，

$$ⓐの積分=\left(\frac{\pi}{\frac{\Delta^2}{2}+i\xi t}\right)^{\frac{1}{2}}\exp\left\{-\frac{(x-v_gt)^2}{2\Delta^2+4i\xi t}\right\}$$

となる．これをⓐに代入して変形するとただちに (2.11) が出てくる． ∎

(2.11) の絶対値の 2 乗をとると，

$$|\psi(x,t)|^2=|A|^2\frac{1}{\sqrt{1+\left(\frac{2\xi t}{\Delta^2}\right)^2}}\exp\left\{-\frac{(x-v_gt)^2}{\Delta^2+\frac{4\xi^2}{\Delta^2}t^2}\right\} \tag{2.12}$$

となる．これは波束の山の頂点が v_g の速度で進んでいることを表している．しかし波束の空間的ひろがりは一定ではなく，$t=0$ で Δ であっても，時刻 t には $\Delta\sqrt{1+\left(\frac{2\xi}{\Delta^2}\right)^2t^2}$ にひろがる．いいかえれば，波束は次第に拡散してぼんやりとしていく．しかし，この波束のぼやける速さは，はじめの波束が小さいほど著しい．

はじめから波束が空間的にひろがっていれば，ぼやける速さは遅くなる．

さて，本論にもどって，波束(2.11)の重心が自由に運動している古典粒子のように運動することを要求してみよう．この古典粒子は運動量 p，運動エネルギー $E=\frac{p^2}{2m}$（m は粒子の質量）をもっているとすると，粒子の速度 $v=\frac{dE}{dp}=\frac{p}{m}$ が波束の群速度 $v_g=\frac{d\omega}{dk}$ と同一視されるべきだから，

$$v_g=\frac{d\omega}{dk}=\frac{p}{m} \tag{2.13}$$

が成り立たなければならない．ここで第 1 章で述べたように，Einstein の関係

$$E=h\nu=\hbar\omega \tag{2.14}$$

が粒子の場合にも成り立つと仮定すると，

$$\omega=\frac{p^2}{2m\hbar} \tag{2.15}$$

だから，(2.13) と (2.15) が両立するためには，

$$p=\hbar k=\frac{h}{\lambda} \tag{2.16}$$

であればよい．これは，まさに de Broglie の関係式である．これで(2.10)の $\omega(k)$ の形が $\omega(k)=\frac{\hbar k^2}{2m}$ と求まった．(2.14)，(2.16) は光子の場合に求められた関係と同じである．

そこで，われわれの波束(2.1)を，p を使って書きかえると，

$$\psi(x,t)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\frac{1}{\hbar}\int_{-\infty}^{\infty}g\left(\frac{p}{\hbar}\right)e^{\frac{i}{\hbar}(px-Et)}dp \tag{2.17}$$

となる．$g(p/\hbar)=\sqrt{\hbar}\,\tilde{\varphi}(p)$ とおくと，

$$\psi(x,t)=\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int_{-\infty}^{\infty}\tilde{\varphi}(p)e^{\frac{i}{\hbar}(px-Et)}dp \tag{2.18}$$

が得られる[1]．

(2.18)の波束 $\psi(x,t)$ を t で微分すると，

$$i\hbar\frac{\partial\psi(x,t)}{\partial t}=\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int_{-\infty}^{\infty}E\tilde{\varphi}(p)e^{\frac{i}{\hbar}(px-Et)}dp \tag{2.19}$$

---

1)　$\psi(x,t=0)\equiv\varphi(x)$ とおけば，$\varphi(x)=\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int^{\infty}\tilde{\varphi}(p)\exp\left(\frac{ipx}{\hbar}\right)dp$ という Fourier 変換によって結ばれている．したがって，逆変換は，$\tilde{\varphi}(p)=\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int_{-\infty}^{\infty}\varphi(x)\exp\left(-\frac{ipx}{\hbar}\right)dx$ となる．

となり，一方 x について 2 階偏微分すると，

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi(x,t)}{\partial x^2}=\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{p^2}{2m}\tilde{\varphi}(p)e^{\frac{i}{\hbar}(px-Et)}dp \tag{2.20}$$

を得る．自由に運動する粒子の場合は，$E=\dfrac{p^2}{2m}$ だから (2.19)，(2.20) の右辺は等しくなり，

$$i\hbar\frac{\partial\psi(x,t)}{\partial t}=-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi(x,t)}{\partial x^2} \tag{2.21}$$

となる．

つまり，波束 $\psi(x,t)$ は (2.21) の偏微分方程式をみたすことがわかる．これが，1 個の自由粒子に対する Schrödinger 方程式である．注目すべきことは，$\psi(x,t)$ は複素数であること，さらに時間 t については 1 次の偏微分をもつことである（光学の場合のように t について 2 次の偏微分をもたぬことに注意）．

このように，粒子―波動の二重性をもつ模型としての波束の議論から，非常に重要な結論が抽出された．さらに，これを導きだしてきた方法そのものによって，対応原理の要求をみたしていることが確かめられる．(2.21) はある意味においては古典的方程式 $E=\dfrac{p^2}{2m}$ の量子的翻訳といえる．すなわち，エネルギーと運動量は，対応規則

$$E\to i\hbar\frac{\partial}{\partial t},\qquad p\to -i\hbar\frac{\partial}{\partial x} \tag{2.22}$$

に従い，$\psi(x,t)$ に作用する微分演算子によって表される．Schrödinger 方程式 (2.21) の解 $\psi(x,t)$ を波動関数とよぶ．

不確定性関係

本節の波束としての粒子の項で議論したように（図 2.1 参照），$|\psi(x,0)|^2$ は $x\sim 0$ に極大をもち，$x=\pm\varDelta$ で $1/e$ に減少するので，そのひろがり幅 $\varDelta x$ は $\varDelta$ のオーダーといえる．他方，$|g(k)|^2$ は $k\sim k_0$ に極大をもち，$k=k_0\pm 1/\varDelta$ で $1/e$ に減少するので，ひろがり幅 $\varDelta k$ は $1/\varDelta$ の程度となる．したがって，2 つの幅の積は，

$$\varDelta x\cdot\varDelta k\sim\varDelta\cdot\frac{1}{\varDelta}=1 \tag{2.23}$$

となる．両辺に $\hbar$ をかけて，de Broglie の関係式 (2.16) を用いると，

$$\varDelta x\cdot\varDelta p\sim\hbar \tag{2.24}$$

なる関係が成立していることになる．上式の右辺の数値がいくらかということは重要ではなく，重要なのは $\varDelta$ の値にいっさい依存しないことである．したがって，$\varDelta x$ を小さくするように波束を作ると $\varDelta p$ は大きくなり，逆に $\varDelta p$ を小さくするように波

束を作ると Δx は大きくなる．一般の波束に対しては，

$$\Delta x \cdot \Delta p \gtrsim \hbar \tag{2.25}$$

のように書いてよい．

(2.25)のような関係を Heisenberg の不確定性関係とよぶ．これは量子力学できわめて深い意義をもつということがだんだん明らかになってくるであろう．この関係は古典力学では決して存在しなかった量子力学特有のものであって，古典力学では座標と運動量とが同時に確定した値をもつことが可能であると考えられたのに対し，量子力学では，それが不可能であることを示している．

例題2　ΔE と Δt との間に(2.25)のような不確定性関係 $\Delta x \cdot \Delta p \gtrsim \hbar$ は存在するか．また，両者の間に違いがあれば，それを議論せよ．

解　粒子のエネルギーの不確定さを ΔE とし，粒子が空間のある点を通る時刻の不確定さを Δt としてみよう．このとき，

$$\Delta x \cdot \Delta p \gtrsim \hbar \qquad \text{ⓐ}$$

を，

$$\frac{m\Delta x}{p} \cdot \frac{p\Delta p}{m} \gtrsim \hbar$$

の形に書きかえてみると，

$$\frac{m\Delta x}{p} \sim \frac{\Delta x}{v} \sim \Delta t, \qquad \frac{p\Delta p}{m} \sim \Delta\left(\frac{p^2}{2m}\right) = \Delta E \tag{2.26}$$

と解釈できるから，

$$\Delta t \cdot \Delta E \gtrsim \hbar \qquad \text{ⓑ}$$

という関係を推論することができる．このような関係は自由粒子の波束(2.18)を用いて推論することもできる．

ⓑはエネルギーを測定するのに要する時間 Δt と，そのときに決まるエネルギーの精度 ΔE との間の関係とみなすこともできる．なぜならば，エネルギー E は振動数 ω を使って $E = \hbar\omega$ と書けるが，よく知られているように，振動数の精度 $\Delta\omega$ とその測定に要する時間 Δt の間には $\Delta t \cdot \Delta\omega \gtrsim 1$ の関係があるからである．

しかし，ⓐの不確定性関係はⓑの不確定性関係とは本質的に異なっている．ⓐでは，x も p も物理量であり一般にこの2つの量が同時に厳密な値をとれないことを意味している．これに反して，ⓑでは，E は物理量ではあるが，t は測定対象そのものの観測量ではなく，粒子の位置や運動量やエネルギーを表す際に使うパラメーターにすぎない．この点が両者の間の物理的な違いといえよう．　▮

3次元への拡張

いままでの1次元的取り扱いは，ただちに3次元へ拡張することができる．$\boldsymbol{r}$ を粒子の位置ベクトル (x, y, z)，$\boldsymbol{k}$ を波数ベクトル (k_x, k_y, k_z) とすれば，(2.2)に相当する $t=0$ での3次元の波束は，

$$\psi(\boldsymbol{r}, 0)=\frac{1}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}}\int g(\boldsymbol{k})e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}d^3k \tag{2.27}$$

となり，Fourier の逆変換を使って，

$$g(\boldsymbol{k})=\frac{1}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}}\int \psi(\boldsymbol{r}, 0)e^{-i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}d^3r \tag{2.28}$$

が得られる．ここで $d^3r=dxdydz$，$d^3k=dk_xdk_ydk_z$ とする．したがって，(2.18)の拡張として，時刻 t における3次元の波束は，運動量ベクトル $\boldsymbol{p}=(p_x, p_y, p_z)$ を使って，

$$\psi(\boldsymbol{r}, t)=\frac{1}{(2\pi\hbar)^{\frac{3}{2}}}\int \tilde{\varphi}(\boldsymbol{p})e^{\frac{i}{\hbar}(\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}-Et)}d^3p \tag{2.29}$$

と書き表せる．そうすると(2.21)を導くのに用いた議論をそのまま拡張して，波動関数 $\psi(\boldsymbol{r}, t)$ で表される自由粒子に対する3次元の Schrödinger の波動方程式は，

$$i\hbar\frac{\partial\psi(\boldsymbol{r}, t)}{\partial t}=-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(\boldsymbol{r}, t)=-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi(\boldsymbol{r}, t) \tag{2.30}$$

となる．ここで，ベクトル，$\nabla=\left(\frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y}, \frac{\partial}{\partial z}\right)$，$\nabla^2=\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}=\Delta$ はラプラシアンである．

(2.21)を，古典論での

$$E=\frac{\boldsymbol{p}^2}{2m} \tag{2.31}$$

と比べてみると，少なくとも3次元の自由粒子については，エネルギーと運動量とは波動関数 $\psi(\boldsymbol{r}, t)$ に作用する微分演算子として，

$$E\rightarrow i\hbar\frac{\partial}{\partial t}, \qquad \boldsymbol{p}\rightarrow -i\hbar\nabla \tag{2.32}$$

のように表せるということを示唆している．

(2.25)の不確定性関係は，3次元においては，

$$\Delta x\cdot\Delta p_x\gtrsim\hbar, \quad \Delta y\cdot\Delta p_y\gtrsim\hbar, \quad \Delta z\cdot\Delta p_z\gtrsim\hbar \tag{2.33}$$

となる．

[問題1] 時刻 $t=0$ で a 程度のひろがりをもった1次元の自由粒子の波束

$$\psi(x, 0)=\varphi(x)=C\exp\left(\frac{ip_0x}{\hbar}-\frac{x^2}{2a^2}\right) \quad ①$$

を考えよう．

(1) $\varphi(x)$ を規格化せよ．

(2) $\tilde{\varphi}(p)$ を計算せよ．

(3) p-空間での波束の幅 Δp，x-空間での波束の幅 Δx を求め，$\Delta p\cdot\Delta x$ を計算せよ．

［解］ (1)　規格化の条件は，

$$\int_{-\infty}^{\infty}|\varphi(x)|^2dx=|C|^2\int_{-\infty}^{\infty}\exp\left(-\frac{x^2}{a^2}\right)dx=1$$

$$\int_{-\infty}^{\infty}\exp\left(-\frac{x^2}{a^2}\right)dx=a\sqrt{\pi}$$

であるから，$C=(a^2\pi)^{-\frac{1}{4}}$

$$\therefore\quad \varphi(x)=\frac{1}{(a^2\pi)^{\frac{1}{4}}}\exp\left(\frac{ip_0x}{\hbar}-\frac{x^2}{2a^2}\right) \qquad ⓐ$$

(2)
$$\tilde{\varphi}(p)=\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int_{-\infty}^{\infty}\varphi(x)\exp\left(-\frac{ipx}{\hbar}\right)dx$$

$$=\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\frac{1}{(a^2\pi)^{\frac{1}{4}}}\int_{-\infty}^{\infty}\exp\left(-i\frac{p-p_0}{\hbar}x\right)\exp\left(-\frac{x^2}{2a^2}\right)dx \qquad ⓑ$$

積分項のなかで $p-p_0\equiv p'$ とおくと，

$$(\text{積分項})=\int_{-\infty}^{\infty}\exp\left(-i\frac{p'x}{\hbar}\right)\exp\left(-\frac{x^2}{2a^2}\right)dx$$

$$=a\sqrt{2\pi}\exp\left(-\frac{a^2}{2\hbar^2}(p-p_0)^2\right)$$

$$\therefore\quad \tilde{\varphi}(p)=\left(\frac{a}{\hbar\sqrt{\pi}}\right)^{\frac{1}{2}}\exp\left(-\frac{a^2}{2\hbar^2}(p-p_0)^2\right) \qquad ⓒ$$

(3) $(\Delta p)^2=\langle(p-\langle p\rangle)^2\rangle=\langle p^2\rangle-\langle p\rangle^2$

$$\langle p^n\rangle=\frac{a}{\hbar\sqrt{\pi}}\int_{-\infty}^{\infty}p^n\exp\left(-\frac{a^2}{\hbar^2}(p-p_0)^2\right)dp \qquad ⓓ$$

$p\to p'+p_0$ とずらし，奇関数の積分が0であることに着目すると，

$$\langle p\rangle=p_0$$

$$\langle p^2\rangle=\frac{a}{\hbar\sqrt{\pi}}\int_{-\infty}^{\infty}p^2\exp\left(-\frac{a^2}{\hbar^2}(p-p_0)^2\right)dp=p_0{}^2+\frac{\hbar^2}{2a^2}$$

$$\therefore\quad (\Delta p)^2=\langle p^2\rangle-\langle p\rangle^2=\frac{\hbar^2}{2a^2} \qquad ⓔ$$

同様にして，$(\Delta x)^2=\langle(x-\langle x\rangle)^2\rangle=\langle x^2\rangle-\langle x\rangle^2$

したがって，

$$\langle x^2\rangle=\frac{1}{a\sqrt{\pi}}\int_{-\infty}^{\infty}x^2\exp\left(-\frac{x^2}{a^2}\right)dx=\frac{1}{a\sqrt{\pi}}\cdot\frac{\sqrt{\pi}}{2}a^3=\frac{a^2}{2}$$

$$\langle x\rangle=0$$

$$\therefore\quad(\Delta x)^2=\frac{a^2}{2} \qquad ⓕ$$

$$\therefore\quad\Delta p\cdot\Delta x=\frac{\hbar}{2} \qquad ⓖ$$

が得られる．①のようにGauss分布の形の波束は$\Delta p\cdot\Delta x$の最小値を与えることが示せる．したがって，この波束は最小のひろがりをもつので最小波束ともよばれている．　▮

［問題 2］　不確定性関係$\Delta x\cdot\Delta p\gtrsim\dfrac{\hbar}{2}$を用いて$H=\dfrac{p^2}{2m}+\dfrac{m}{2}\omega^2x^2$で記述される1次元調和振動子の基底状態のエネルギーを概算せよ．

［解］　$x=0$を中心に対称的に振動するから$\langle x\rangle=\langle p\rangle=0$となる．そこで，$\Delta x\cdot\Delta p\gtrsim\hbar/2$を$x\cdot p\gtrsim\hbar/2$とおきかえる．

$\therefore\quad E\gtrsim\dfrac{\hbar^2}{8m}\dfrac{1}{x^2}+\dfrac{1}{2}m\omega^2x^2$であり$x^2=\dfrac{\hbar}{2m\omega}$のとき最小になる．

つまり，$E\gtrsim\dfrac{\hbar\omega}{4}+\dfrac{\hbar\omega}{4}=\dfrac{\hbar\omega}{2}$を得る．　▮

［問題 3］　水素原子の基底状態のエネルギーを$\Delta r\cdot\Delta p\sim\hbar$を用いて概算せよ．

［解］　陽子と電子がrだけ離れていれば$V(r)=-\dfrac{e^2}{r}$である．両者の平均距離$\approx r_0$とすると$\langle V\rangle=-e^2/r_0$となる．

もし，電子がr_0の大きさに閉じ込められているとすると，$\Delta p\sim\hbar/r_0$となる．いいかえると運動量の平均が0であるから，$\Delta p=p$で，$\langle T\rangle\simeq(\Delta p)^2/2m\simeq\hbar^2/2mr_0^2$．ゆえに不確定性関係と両立する全エネルギーは，

$$\langle E\rangle=\langle T\rangle+\langle V\rangle=\frac{\hbar^2}{2mr_0^2}-\frac{e^2}{r_0}$$

$\langle E\rangle$の最小を求めるため$\dfrac{\partial}{\partial r_0}\langle E\rangle=0$とおくと，$r_0=a=\dfrac{\hbar^2}{me^2}$となり$E_{\min}=-\dfrac{me^4}{2\hbar^2}$を得る．このように不確定性原理のおかげで，原子の最小の大きさが保たれていることがわかる．　▮

2.2 Schrödinger の波動方程式

波動方程式のみたすべき条件

前節では，重ね合わせの原理を指導原理として波束を作り，その波束が自由に運動している古典粒子を表すことを要求して，1 つの自由粒子に対する Schrödinger の波動方程式（(2.21)，(2.30)参照）を推測した[1].

この方程式は，つぎの 2 つの重要な性質を備えている.

1. 波動関数 ψ に関して線型である. すなわち, 重ね合わせの原理をみたしている.
2. 時刻 t に関して 1 階の偏微分方程式であり，時刻 $t=0$ での波動関数の値がわかれば，その後の任意の時刻での波動関数が求められる.

そこで，ポテンシャルエネルギー $V(r)$ が存在する一般の場合にも上の性質 1, 2 を波動方程式のみたすべき基本的性質として要求することにしよう.

ポテンシャルがあるときの Schrödinger 方程式

物理系の波動方程式の形は，系のハミルトニアンによって決定される. 性質 1, 2 の要請をみたす波動方程式のなかで最も一般的な形は，

$$i\hbar\frac{\partial\psi(\boldsymbol{r},t)}{\partial t}=H\psi(\boldsymbol{r},t) \tag{2.34}$$

のように書くことができる. H はある線型演算子であり, エネルギーの次元をもつ.

2.1 節で議論したように，自由粒子に対する 3 次元の Schrödinger 方程式は，(2.30)

$$i\hbar\frac{\partial\psi(\boldsymbol{r},t)}{\partial t}=-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi(\boldsymbol{r},t)$$

で与えられた. これは自由粒子の古典的ハミルトニアン

$$H_{\rm cl}=\frac{\boldsymbol{p}^2}{2m} \tag{2.35}$$

を用いて，古典粒子のエネルギーEを $E=\dfrac{\boldsymbol{p}^2}{2m}$ と表し，対応規則(2.32)

$$E\to i\hbar\frac{\partial}{\partial t},\qquad \boldsymbol{p}\to -i\hbar\nabla$$

に従っておきかえ，波動関数 $\psi(\boldsymbol{r},t)$ に作用させて得た方程式である.

ポテンシャル $V(\boldsymbol{r})$ のなかにおかれた古典粒子のハミルトニアンは，

---

1)　これまで波束が粒子を表すと考えてきた. この考えは Schrödinger 方程式をもっともらしくするのに力があったが，以後は，これを忘れてよい. 重要なのは Schrödinger 方程式の解である波動関数 $\psi(\boldsymbol{r},t)$ である. その物理的解釈については，あとで述べる.

$$H_{\mathrm{cl}}=\frac{\boldsymbol{p}^2}{2m}+V(\boldsymbol{r})=E \tag{2.36}$$

で与えられるから，ここで対応規則(2.32)のおきかえをすれば，

$$i\hbar\frac{\partial\psi(\boldsymbol{r},t)}{\partial t}=\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta+V(\boldsymbol{r})\right]\psi(\boldsymbol{r},t) \tag{2.37}$$

が得られる．すなわち，(2.34)のHは，

$$H=-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta+V(\boldsymbol{r}) \tag{2.38}$$

で与えられる演算子で，これをハミルトン演算子またはハミルトニアンとよぶ．(2.37)の方程式は Schrödinger が 1926 年に提唱した式であって，ポテンシャル $V(\boldsymbol{r})$ のなかでの質量 m の粒子の運動を記述する Schrödinger の波動方程式である．しかしながら，この形式的なおきかえによって得られた方程式を Schrödinger 方程式の導出と考えるべきではない．これは，古典力学において Newton の方程式が導出されたのではないのと同様である．この方程式(2.37)が正しいものであることは，この方程式によって得られたすべての結論が実験と一致することによって証明される．そこで，この Schrödinger 方程式を量子力学における基礎方程式として認めることにしよう[1]．

2.3 波動関数と Born の確率解釈

まずはじめに，ただ 1 つの粒子からなる量子系をとりあげ，Schrödinger 方程式の解である波動関数 $\psi(\boldsymbol{r},t)$ がどのような物理的意味をもつかを考えてみよう．2.1 節において，波束が粒子の空間的な行動をよく説明してくれたことから，それと同じ形の方程式をみたすところの波動関数も粒子の空間的行動をなんらかの意味で与えるものではなかろうか．

Schrödinger は最初，粒子が雲のようにひろがり，その密度が $|\psi(\boldsymbol{r},t)|^2$ で与えられるという実在波の立場をとった．しかしながら，実験によれば，

1. 電子はいつも粒子として観測されるのであって，1 個の電子の密度分布が空間にひろがって見い出されることは決してない．いいかえれば，1 個の電子は空間のどこか一カ所にあれば，その質量や電荷が全部そこにあるのであって，それ以外の場所に電子のかけらを観測することは決してない．電子は不可分の粒子なのである．

1) 波動関数の時間についての発展の仕方を，粒子のすべての可能な経路についての積分に関係させる経路積分に基づく Feynman の量子力学の構成については，第 16 章を参照されたい．

一方，

2. 1.4 節で述べたように，Davisson と Germer その他の実験によって観測された電子の波動性を説明するためには，結晶を通過したあとの電子の空間分布は，その点における波の相対強度に比例すると仮定する必要があった．1個の電子は結晶を通過したあとに乾板に入射し，現像後に乾板のどこか小部分に黒化を生じさせる．多数の電子が乾板上に入射して，はじめて回折の規則性が観測される．

Born の確率解釈

これらのことを考慮して，Born は波動関数についてつぎのような物理的意味づけを行った．

波動関数 $\psi(\boldsymbol{r},t)$ で表される状態において時刻 t に電子の位置の測定を行うとき，点 r を含む d^3r 内に電子が見い出される確率は，

$$\rho(\boldsymbol{r},t)d^3r=\psi^*(\boldsymbol{r},t)\psi(\boldsymbol{r},t)d^3r=|\psi(\boldsymbol{r},t)|^2d^3r \tag{2.39}$$

に比例する．Schrödinger 方程式は，その両辺に任意の複素数をかけても成り立つから，ψ に適当な数をかけて，

$$\int|\psi(\boldsymbol{r},t)|^2d^3r=1 \tag{2.40}$$

のように規格化できれば，$|\psi(\boldsymbol{r},t)|^2$ は粒子が空間の $\boldsymbol{r}$ なる場所に位置することの**絶対確率密度**を与える．

(2.40)の積分が収束するとき，$\psi(\boldsymbol{r},t)$ を**2乗積分可能な関数**という．しかし，場合によっては $\int|\psi(\boldsymbol{r},t)|^2d^3r=\infty$ のような状態をも考えたほうが便利なこともある．この場合には，波動関数は(2.40)では規格化されず，$|\psi(\boldsymbol{r},t)|^2$ は絶対確率密度ではない．このときでも異なる $\boldsymbol{r}$ についての $|\psi(\boldsymbol{r},t)|^2$ の相対的な値は，対応する位置座標の値をとる相対確率を与える．この種の関数を規格化する問題は，あとで調べることにしよう(4.4 節参照)．

したがって量子力学では，粒子はあくまでも粒子と考え，波動関数は粒子の統計的ふるまいを定めるものと考える．すなわち量子力学では，粒子の空間的ふるまいについて理論が答を与えても，それは1個の粒子の1回限りの実験の結果として現れるものではなく，1個の粒子による実験を多数回繰り返したときに，はじめて認められる．実際の実験では，多数の粒子があとからあとから流れてきて現象を繰り返していくので，事実上はこの種の実験の繰り返しが行われたと考えてよく，$|\psi(\boldsymbol{r},t)|^2$ に従って粒子が分布した結果が観測されることになる．

2.4 確率の保存と確率の流れ

確率の保存

前節に述べた Born の確率解釈が首尾一貫するためには，(2.40)の左辺の積分が時間に関して無関係でなければならない．実際そうなっていることを示すために，この積分を時間で微分してみると，

$$\begin{aligned}
&\frac{d}{dt}\int|\psi(\boldsymbol{r},t)|^2 d^3r\\
&=\int\left\{\psi^*(\boldsymbol{r},t)\frac{\partial\psi(\boldsymbol{r},t)}{\partial t}+\frac{\partial\psi^*(\boldsymbol{r},t)}{\partial t}\psi(\boldsymbol{r},t)\right\}d^3r\\
&=-\frac{\hbar}{2mi}\int[\psi^*(\boldsymbol{r},t)\Delta\psi(\boldsymbol{r},t)-\{\Delta\psi^*(\boldsymbol{r},t)\}\psi(\boldsymbol{r},t)]d^3r\\
&=-\frac{\hbar}{2mi}\int\nabla\cdot[\psi^*(\boldsymbol{r},t)\nabla\psi(\boldsymbol{r},t)-\{\nabla\psi^*(\boldsymbol{r},t)\}\psi(\boldsymbol{r},t)]d^3r\\
&=-\frac{\hbar}{2mi}\int_S[\psi^*(\boldsymbol{r},t)\nabla\psi(\boldsymbol{r},t)-\{\nabla\psi^*(\boldsymbol{r},t)\}\psi(\boldsymbol{r},t)]_n dS
\end{aligned}\tag{2.41}$$

が得られる[1]．この変形に利用したのは，Schrödinger 方程式(2.37)より，

$$\frac{\partial\psi(\boldsymbol{r},t)}{\partial t}=\frac{1}{i\hbar}\left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi(\boldsymbol{r},t)+V(\boldsymbol{r})\psi(\boldsymbol{r},t)\right\}\tag{2.42}$$

とその複素共役

$$\frac{\partial\psi^*(\boldsymbol{r},t)}{\partial t}=-\frac{1}{i\hbar}\left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi^*(\boldsymbol{r},t)+V(\boldsymbol{r})\psi^*(\boldsymbol{r},t)\right\}\tag{2.43}$$

および $V(\boldsymbol{r})$ が実数ということである．

いま，フラックスとよばれるベクトル $\boldsymbol{j}(\boldsymbol{r},t)$ をつぎのように定義しよう．

$$\begin{aligned}
\boldsymbol{j}(\boldsymbol{r},t)&=\frac{\hbar}{2mi}[\psi^*(\boldsymbol{r},t)\nabla\psi(\boldsymbol{r},t)-\{\nabla\psi^*(\boldsymbol{r},t)\}\psi(\boldsymbol{r},t)]\\
&=\frac{1}{m}\mathrm{Re}[\psi^*(\boldsymbol{r},t)\frac{\hbar}{i}\nabla\psi(\boldsymbol{r},t)]
\end{aligned}\tag{2.44}$$

これを使ってやると(2.41)は，

$$\begin{aligned}
\frac{d}{dt}\int|\psi(\boldsymbol{r},t)|^2 d^3r&=-\int\nabla\cdot\boldsymbol{j}(\boldsymbol{r},t)d^3r\\
&=-\int j_n(\boldsymbol{r},t)dS
\end{aligned}\tag{2.45}$$

となる．波束の場合には規格化積分は収束し，ψ は遠方で 0 になるのでこの表面積

1) 以後，とくに断わらない限り，空間積分は全空間にわたって行うものとする．最後の積分は Green の定理を使って得られたもので，S は積分領域の境界面であり $[\quad]_n$ は括弧のなかのベクトルの面積要素 dS の外向きの法線方向の成分を意味する．

分は 0 になる．ゆえに，

$$\int |\psi(\boldsymbol{r}, t)|^2 d^3 r = (\text{一定}) \tag{2.46}$$

である．$t=0$ でこの値を 1 と規格化しておくと，$\psi(\boldsymbol{r}, t)$ が t とともに変化しても，規格化は保たれることがこれでわかる[1]．すなわち，Schrödinger の波動方程式が確率の保存を保障しているのである．

確率の流れの概念

(2.45)の結果を導いた手続きから，

$$\frac{\partial \rho(\boldsymbol{r}, t)}{\partial t} + \nabla \cdot \boldsymbol{j}(\boldsymbol{r}, t) = 0 \tag{2.47}$$

という局所的な関係が同時に成り立っていることもわかる．

例題　$V(\boldsymbol{r})$ が実数であるとき，この関係式(2.47)を確かめよ．

解

$$\begin{aligned}\frac{\partial \rho(\boldsymbol{r}, t)}{\partial t} &= \frac{\partial}{\partial t}[\psi^*(\boldsymbol{r}, t)\psi(\boldsymbol{r}, t)] = \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial t} + \frac{\partial \psi^*}{\partial t}\psi \\ &= -\frac{\hbar}{2mi}[\psi^* \Delta \psi - \psi \Delta \psi^*]\end{aligned} \qquad \text{ⓐ}$$

ここで，Schrödinger 方程式(2.42)，(2.43)と $V(\boldsymbol{r})$ が実数であるという性質を使った．

一方，(2.44)を用いて，

$$\begin{aligned}\nabla \cdot \boldsymbol{j}(\boldsymbol{r}, t) &= \frac{\hbar}{2mi}[(\nabla \psi^*)(\nabla \psi) + \psi^* \Delta \psi - (\nabla \psi)(\nabla \psi^*) - \psi \Delta \psi^*] \\ &= \frac{\hbar}{2mi}[\psi^* \Delta \psi - \psi \Delta \psi^*]\end{aligned} \qquad \text{ⓑ}$$

ゆえに，ⓐ，ⓑより，

$$\frac{\partial \rho(\boldsymbol{r}, t)}{\partial t} + \nabla \cdot \boldsymbol{j}(\boldsymbol{r}, t) = 0$$

が成り立つ．　▮

この式は流体力学でなじみが深い．これは湧き出しや吸い込みがない場合に密度 ρ，流れ $\boldsymbol{j}$ をもつ流体の保存法則である．したがって(2.44)で与えられている $\boldsymbol{j}(\boldsymbol{r}, t)$を確率の流れの密度と解釈することができる．

---

1)　平面波 $\exp[i(\boldsymbol{k} \cdot \boldsymbol{r} - \omega t)]$ のような型の波動関数では $\int |\psi(\boldsymbol{r}, t)|^2 d^3 r = \infty$ になるが，このような場合には ψ が境界面上で周期的境界条件をもつような有限の大きさの立方体の箱を使って規格化することができる(4.5 節参照)．これらの場合，(2.45)の表面積分はやはり 0 になり，規格化積分は時間がたっても変わらないということを容易に示すことができる．

確率の流れの密度 $\boldsymbol{j}$ に電子の電荷 $-e$ をかければ，ψ で表される1個の電子の運動にともなう電流密度が得られる．もし ψ が実数であれば，$\psi^*=\psi$ だから(2.44)の $\boldsymbol{j}$ は0となってしまう．したがって実数の関数だけを用いたのでは，粒子が一方向に流れて質量や電荷を運んでいる状態を表すことができない．

[問題 4] 自由粒子を表す波動関数 $\psi(\boldsymbol{r}, t)=A\exp\left[\frac{i}{\hbar}(\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}-Et)\right]$ を考える．確率の流れの密度 $\boldsymbol{j}$ と粒子の速度 $\boldsymbol{v}$ との関係を求めよ．

[解] (2.44)を用いて $\boldsymbol{j}(\boldsymbol{r}, t)$ を計算すると，

$$\boldsymbol{j}(\boldsymbol{r}, t)=\frac{\hbar}{2mi}(\psi^*\nabla\psi-\psi\nabla\psi^*)$$

$$=\frac{\hbar}{2mi}|A|^2\frac{2i\boldsymbol{p}}{\hbar}=|A|^2\frac{\boldsymbol{p}}{m}=|A|^2\boldsymbol{v} \qquad ⓐ$$

一方，確率密度

$$\rho(\boldsymbol{r}, t)=|\psi(\boldsymbol{r}, t)|^2=|A|^2 \qquad ⓑ$$

$$\therefore \quad \boldsymbol{j}=\rho\boldsymbol{v} \qquad ⓒ$$

となり，ρ も $\boldsymbol{j}$ も時間には依存せず，速度 $\boldsymbol{v}$ で流れている空間密度 ρ の粒子線というイメージが成り立つ． ▮

[問題 5] 粒子を表す波動関数を実数の関数 $\psi(\boldsymbol{r},t)=A\cos\frac{\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}-Et}{\hbar}$ としてみよう．物理的にはどのようなふつごうが生じるだろうか．

[解] (2.44)より確率の流れ $\boldsymbol{j}$ を計算すると，

$$\boldsymbol{j}(\boldsymbol{r}, t)=0 \qquad ⓐ$$

となる．一方，

$$\rho=\psi^*(\boldsymbol{r}, t)\psi(\boldsymbol{r}, t)=A^2\cos^2\frac{\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}-Et}{\hbar} \qquad ⓑ$$

となる．したがって，確率の流れの密度は0になり，確率密度は空間的に一様でない．ⓐ，ⓑを代入すれば明らかなように連続の式(2.47)はみたされていない．したがって粒子の運動を表す波動関数としては不適格である． ▮

2.5 物理量の期待値と演算子

位置の確率密度 $\rho(\boldsymbol{r}, t)$ に対して採用された定義が矛盾を含まないことが確かめられたので，これを使って位置座標，運動量，エネルギー等の物理量の期待値を計算することができる．

位置ベクトルの期待値

粒子の位置ベクトル $\boldsymbol{r}$ が定まった値をとる確率密度が，規格化された波動関数 $\psi(\boldsymbol{r}, t)$ によって，$\rho(\boldsymbol{r}, t)=\psi^*(\boldsymbol{r}, t)\psi(\boldsymbol{r}, t)$ で与えられることを考慮すれば，確率論の定理によりこの状態における $\boldsymbol{r}$ の期待値は，

$$\langle \boldsymbol{r} \rangle=\int \boldsymbol{r}\rho(\boldsymbol{r}, t)d^3r=\int \psi^*(\boldsymbol{r}, t)\boldsymbol{r}\psi(\boldsymbol{r}, t)d^3r \tag{2.48}$$

のように表される．

期待値というのは，たった 1 回の測定に対する確率論的な意味での数学的な予測を示すものであるが，また別のいい方をすれば 2.3 節で論じたように多数回の測定を行ったときの結果の平均値でもある．ここに空間の座標は積分されてしまっているので，期待値は時間 t のみの関数である．粒子の位置座標 $\boldsymbol{r}$ だけの任意の関数 $f(\boldsymbol{r})$ の期待値も同じようにして求めることができ，

$$\begin{aligned}\langle f(\boldsymbol{r}) \rangle&=\int f(\boldsymbol{r})\rho(\boldsymbol{r}, t)d^3r \\ &=\int \psi^*(\boldsymbol{r}, t)f(\boldsymbol{r})\psi(\boldsymbol{r}, t)d^3r\end{aligned} \tag{2.49}$$

となる[1]．

運動量の期待値

それでは速度，運動量のような物理量の期待値を求めるにはどうしたらよいであろうか．この場合も対応原理を用いて定義することができる．いま，ある波束を考え，その波束を用いて計算した物理量の期待値が古典粒子の運動に一致することを要求してみよう．たとえば $\langle \boldsymbol{r} \rangle$ の時間微分は古典粒子の速度に対応する．簡単のため x 成分について計算すると，

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt}\langle x \rangle&=\frac{d}{dt}\int \psi^*(\boldsymbol{r}, t)x\psi(\boldsymbol{r}, t)d^3r \\ &=\int \psi^*(\boldsymbol{r}, t)x\frac{\partial \psi(\boldsymbol{r}, t)}{\partial t}d^3r \\ &\quad+\int \frac{\partial \psi^*(\boldsymbol{r}, t)}{\partial t}x\psi(\boldsymbol{r}, t)d^3r\end{aligned} \tag{2.50}$$

となる．(2.42)，(2.43) を代入し，さらに V が実数であるという仮定を使うと，

$$\frac{d}{dt}\langle x \rangle=\frac{i\hbar}{2m}\int [\psi^* x(\Delta \psi)-(\Delta \psi^*)x\psi]d^3r \tag{2.51}$$

右辺第 2 項の積分で部分積分をすると，

---

1)　すぐあとで，一般の物理量の期待値を議論するが，$\langle f \rangle$ を (2.49) のように ψ^* が ψ の前にくるような配列順序を採用すると便利であることがわかる [(2.55) 参照]．

$$\int (\Delta\psi^*)x\psi d^3r = \int_S \{(\nabla\psi^*)x\psi\}_n dS - \int \nabla\psi^* \cdot \nabla(x\psi)d^3r$$
$$= -\int \nabla\psi^* \cdot \nabla(x\psi)d^3r$$

ここで波束は遠方では 0 になるから表面積分が 0 になることを用いた．もう一度，部分積分をしたあと，表面項が消えることを使うと，

$$\int (\Delta\psi^*)x\psi d^3r = \int \psi^* \Delta(x\psi)d^3r$$

となる．これを(2.51)に代入すると，

$$\frac{d}{dt}\langle x\rangle = \frac{i\hbar}{2m}\int \psi^*[x(\Delta\psi) - \Delta(x\psi)]d^3r$$
$$= \frac{1}{m}\int \psi^* \frac{\hbar}{i}\frac{\partial\psi}{\partial x}d^3r \tag{2.52}$$

を得る．ここで $\Delta(x\psi) = x(\Delta\psi) + 2\dfrac{\partial\psi}{\partial x}$ を使った．そこで一般に，

$$\frac{d}{dt}\langle \boldsymbol{r}\rangle = \frac{1}{m}\int \psi^* \frac{\hbar}{i}\nabla\psi d^3r \tag{2.53}$$

と書くことができ，

$$m\frac{d}{dt}\langle \boldsymbol{r}\rangle = \int \psi^* \frac{\hbar}{i}\nabla\psi d^3r \tag{2.54}$$

を得る．この式の左辺は粒子の質量と古典速度の積であり，期待値は古典力学の法則をみたすという仮定から，(2.54)の右辺は粒子の運動量の期待値に等しくならなければならない．したがって，運動量の期待値は，

$$\langle \boldsymbol{p}\rangle = \int \psi^* \frac{\hbar}{i}\nabla\psi d^3r \tag{2.55}$$

のように，運動量の演算子 $(\hbar/i)\nabla$ を ψ に作用させ，左側から ψ^* をかけて全空間で積分したものと同一視できる(これで(2.49)の脚注の意味が明解になろう)．

例題 1　位置ベクトルの期待値のときと同様に，運動量空間で粒子の運動量が $\boldsymbol{p}$ という値をとる確率は，規格化された波動関数 $\tilde{\psi}(\boldsymbol{p}, t)$ によって $\tilde{\psi}^*(\boldsymbol{p}, t)\tilde{\psi}(\boldsymbol{p}, t)$ で与えられるから $\boldsymbol{p}$ の期待値は，

$$\langle \boldsymbol{p}\rangle = \int \tilde{\psi}^*(\boldsymbol{p}, t)\boldsymbol{p}\tilde{\psi}(\boldsymbol{p}, t)d^3p \qquad ①$$

のように表される．ここで $\tilde{\psi}(\boldsymbol{p}, t)$ は，

$$\tilde{\psi}(\boldsymbol{p}, t) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{\frac{3}{2}}}\int \psi(\boldsymbol{r}, t)e^{-\frac{i}{\hbar}\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}}d^3r \qquad ②$$

と $\psi(\boldsymbol{r}, t)$ の Fourier 変換で結ばれている．②を①に代入して $\langle \boldsymbol{p}\rangle$ はやはり(2.55)で

与えられることを証明せよ．

解　②の $\tilde{\psi}(\boldsymbol{p}, t)$ とその複素共役 $\tilde{\psi}^*(\boldsymbol{p}, t)$ を①に代入すると，

$$\langle \boldsymbol{p} \rangle = \frac{1}{(2\pi\hbar)^3}\int \psi^*(\boldsymbol{r}', t)e^{\frac{i}{\hbar}\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}'}\boldsymbol{p}\psi(\boldsymbol{r}, t)e^{-\frac{i}{\hbar}\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}}d^3p\, d^3r\, d^3r' \qquad ⓐ$$

となる．ここでつぎの関係に注意しよう．

$$\boldsymbol{p}e^{-\frac{i}{\hbar}\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}} = -\frac{\hbar}{i}\nabla e^{-\frac{i}{\hbar}\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}} \qquad ⓑ$$

ⓑをⓐに代入すると，

$$\langle \boldsymbol{p} \rangle = \frac{1}{(2\pi\hbar)^3}\int \psi^*(\boldsymbol{r}', t)e^{\frac{i}{\hbar}\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}'}\psi(\boldsymbol{r},t)\left(-\frac{\hbar}{i}\nabla e^{-\frac{i}{\hbar}\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}}\right)d^3p\, d^3r\, d^3r'$$

$$= \frac{1}{(2\pi\hbar)^3}\int \psi^*(\boldsymbol{r}', t)e^{\frac{i}{\hbar}\boldsymbol{p}\cdot(\boldsymbol{r}'-\boldsymbol{r})}\frac{\hbar}{i}\nabla\psi(\boldsymbol{r}, t)d^3p\, d^3r\, d^3r'$$

が得られる．部分積分の際，表面項が消えることに注意．

$$\frac{1}{(2\pi\hbar)^3}\int e^{\frac{i}{\hbar}\boldsymbol{p}\cdot(\boldsymbol{r}'-\boldsymbol{r})}d^3p = \delta^{(3)}(\boldsymbol{r}'-\boldsymbol{r})$$

を用いると，

$$\langle p \rangle = \int \psi^*(\boldsymbol{r}, t)\frac{\hbar}{i}\nabla\psi(\boldsymbol{r}, t)d^3r \qquad ⓒ$$

が導ける．　▮

例題 2　同じようにして次式を証明せよ．

$$\langle \boldsymbol{p}^n \rangle = \int \psi^*(\boldsymbol{r}, t)\left(\frac{\hbar}{i}\nabla\right)^n\psi(\boldsymbol{r}, t)d^3r \qquad ①$$

解　例題1と同様にして，

$$\langle \boldsymbol{p}^n \rangle = \int \tilde{\psi}^*(\boldsymbol{p}, t)\boldsymbol{p}^n\tilde{\psi}(\boldsymbol{p}, t)d^3p \qquad ⓐ$$

例題1②の $\tilde{\psi}(\boldsymbol{p}, t)$ と $\tilde{\psi}^*(\boldsymbol{p}, t)$ をⓐに代入し，

$$\boldsymbol{p}^n e^{-\frac{i}{\hbar}\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}} = \left(-\frac{\hbar}{i}\nabla\right)^n e^{-\frac{i}{\hbar}\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}} = \left(-\frac{\hbar}{i}\right)^n\nabla^n(e^{-\frac{i}{\hbar}\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}}) \qquad ⓑ$$

に注意して n 回部分積分をして表面項をおとすと，

$$\langle \boldsymbol{p}^n \rangle = \frac{1}{(2\pi\hbar)^3}\int \psi^*(\boldsymbol{r}', t)e^{\frac{i}{\hbar}\boldsymbol{p}\cdot(\boldsymbol{r}'-\boldsymbol{r})}\left(\frac{\hbar}{i}\nabla\right)^n\psi(\boldsymbol{r}, t)d^3p\, d^3r\, d^3r'$$

$\boldsymbol{p}$ 積分をすると $\delta^{(3)}(\boldsymbol{r}'-\boldsymbol{r})$ が得られるので，しかるのち $\boldsymbol{r}'$ 積分をするとただちに①が得られる．

この結果を任意の整関数 $f(\boldsymbol{p}) = \sum_n a_n\boldsymbol{p}^n$ に拡張することができ，

$$\langle f(\boldsymbol{p}) \rangle = \int \psi^*(\boldsymbol{r}, t)f\left(\frac{\hbar}{i}\nabla\right)\psi(\boldsymbol{r}, t)d^3r \qquad (2.56)$$

を容易に証明することができる． ∎

この関係式を用いれば，Fourier 変換に立ち入ることなしに $f(\boldsymbol{p})$ の期待値を計算できるという点が非常に重要である．すなわち，$\psi(\boldsymbol{r}, t)$ を Fourier 変換して $\tilde{\psi}(\boldsymbol{p}, t)$ を計算したあと，

$$\langle f(\boldsymbol{p})\rangle=\int\tilde{\psi}^*(\boldsymbol{p}, t)f(\boldsymbol{p})\tilde{\psi}(\boldsymbol{p}, t)d^3p$$

により期待値を計算するかわりに，

$$\langle f(\boldsymbol{p})\rangle=\int\psi^*(\boldsymbol{r}, t)f(\boldsymbol{p})\psi(\boldsymbol{r}, t)d^3r \tag{2.57}$$

とおき，$f(\boldsymbol{p})$ の $\boldsymbol{p}$ を微分演算子 $(\hbar/i)\nabla$ でおきかえて右側の $\psi(\boldsymbol{r}, t)$ に作用させ，左側から $\psi^*(\boldsymbol{r}, t)$ をかけて全空間で積分することにより，もとの $\psi(\boldsymbol{r}, t)$ から直接期待値を計算することができる．

例題 3　Schrödinger 方程式を用いて，

$$\frac{d}{dt}\langle p_x\rangle=-\int\psi^*\frac{\partial V}{\partial x}\psi d^3r \qquad ①$$

を導け．

解

$$\frac{d}{dt}\langle p_x\rangle=\frac{\hbar}{i}\left[\int\frac{\partial\psi^*}{\partial t}\frac{\partial\psi}{\partial x}d^3r+\int\psi^*\frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{\partial\psi}{\partial t}\right)d^3r\right]$$
$$=\int\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi^*+V\psi^*\right)\frac{\partial\psi}{\partial x}d^3r-\int\psi^*\frac{\partial}{\partial x}\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi+V\psi\right)d^3r$$
$$=-\frac{\hbar^2}{2m}\int\left\{(\Delta\psi^*)\frac{\partial\psi}{\partial x}-\psi^*\Delta\frac{\partial\psi}{\partial x}\right\}d^3r+\int\left\{V\psi^*\frac{\partial\psi}{\partial x}-\psi^*\frac{\partial}{\partial x}(V\psi)\right\}d^3r \qquad ⓐ$$

ⓐの右辺第 1 項は Green の定理を使って表面積分になおすことができ，波束の性質よりこの表面項は消える．したがって，

$$\frac{d}{dt}\langle p_x\rangle=-\int\psi^*\frac{\partial V}{\partial x}\psi d^3r$$

が導けた． ∎

あるいは，もっと一般的に，

$$\frac{d}{dt}\langle\boldsymbol{p}\rangle=-\int\psi^*(\nabla V)\psi d^3r=-\langle\nabla V\rangle=\langle\boldsymbol{F}\rangle \tag{2.58}$$

と書ける．これは Newton の第 2 法則に対応している．

運動エネルギーの期待値

まず，運動エネルギーの期待値 $\langle\frac{\boldsymbol{p}^2}{2m}\rangle$ よりはじめよう．関係式(2.56) を使えば，ただちに，

$$\langle\frac{\boldsymbol{p}^2}{2m}\rangle=\int\psi^*\left(-\frac{\hbar^2\nabla^2}{2m}\right)\psi d^3r=\int\psi^*\left(-\frac{\hbar^2\Delta}{2m}\right)\psi d^3r \tag{2.59}$$

であることが明白である．

全エネルギーの期待値

全エネルギーの期待値を計算するときにも，運動量のときと同様に微分演算子の表示が使えるものとする．

こういう微分演算子を位置の確率関数 ρ とどのように関連させるべきかということが問題になるが，

$$\langle E\rangle=\langle\frac{\boldsymbol{p}^2}{2m}\rangle+\langle V\rangle \tag{2.60}$$

という古典論のエネルギー方程式に類似の関係をみたすことを要求しておこう．いま Schrödinger 方程式(2.37)に左から ψ^* をかけ全空間にわたって積分すると，

$$\int\psi^* i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}d^3r=\int\psi^*\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi\right)d^3r+\int\psi^* V\psi d^3r \tag{2.61}$$

となるから，

$$\langle E\rangle=\int\psi^* i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}d^3r \tag{2.62}$$

と定義しておけば Schrödinger 方程式(2.37)と(2.60)の間に矛盾を生じない．

物理量の演算子

これまで，位置ベクトル，運動量，全エネルギー等の物理量の期待値を求めるためには，演算子を導入して，(2.56)のような積分を実行することにより $\psi(\boldsymbol{r},t)$ から直接期待値を計算できることがわかった．

今後，物理量 A に対応した演算子を $\hat{A}$ とよぶことにしよう(演算子であっても $\hat{A}$ と書かず，物理量 A と同じ記号を使うこともしばしば見受けられる)．座標の演算子 $\hat{\boldsymbol{r}}$ は座標 $\boldsymbol{r}$ と一致する($\hat{\boldsymbol{r}}=\boldsymbol{r}$)が，運動量演算子は $\hat{\boldsymbol{p}}=(\hbar/i)\nabla$ であり，運動エネルギーの演算子は $\hat{T}=\frac{\hat{\boldsymbol{p}}^2}{2m}=-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta$ であり，全エネルギーに対応する演算子はハミルトニアン $\hat{H}=-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta+V(\boldsymbol{r})$ である．$f(\boldsymbol{r},\boldsymbol{p})$ という物理量に対応する演算子は，$\boldsymbol{r}$ と $\boldsymbol{p}$ をそれぞれ $\hat{\boldsymbol{r}}=\boldsymbol{r}$ と $\hat{\boldsymbol{p}}=-(\hbar/i)\nabla$ とおきかえることで得られる(このような単純な対応が正しいのは，直交座標をとっている場合だけである．曲線座標を用いた量子化の問題については第4章で議論する．表2.1に量子力学で用いられる最も簡単な演算子の具体的な形を示しておこう)．

量子力学では，演算子相互の交換関係が重要な役割をはたしているので，表2.1にあげた演算子についてその関係を調べておこう．古典力学との最も大きな違いは，

表2.1 量子力学の最も簡単な演算子

	物理量	演算子
座標	$\boldsymbol{r}$	$\boldsymbol{r}$
運動量	$\boldsymbol{p}$	$\dfrac{\hbar}{i}\nabla$
運動エネルギー	$\dfrac{\boldsymbol{p}^2}{2m}$	$-\dfrac{\hbar^2}{2m}\nabla^2$
位置エネルギー	$V(\boldsymbol{r})$	$V(\boldsymbol{r})$
非相対論的近似のエネルギー	$E=\dfrac{\boldsymbol{p}^2}{2m}+V(\boldsymbol{r})$	$\hat{H}=-\dfrac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+V(\boldsymbol{r})$

演算子が演算の順序によって，一般には，異なる結果を与えるということである．つまり，$\hat{A}$ と $\hat{B}$ を 2 つの演算子とするとき，$\hat{A}\hat{B}$ と $\hat{B}\hat{A}$ は一般には異なる．$\hat{A}\hat{B}-\hat{B}\hat{A}$ のことを $[\hat{A},\hat{B}]$ と書き，$\hat{A}$ と $\hat{B}$ の交換子とよぶ．

2 つの演算子 $\hat{A},\hat{B}$ の積の順序が交換する(可換である)ときは，任意の ψ に対して，

$$[\hat{A},\hat{B}]\psi=0 \tag{2.63}$$

が成立していなければならない．可換でない場合には，

$$[\hat{A},\hat{B}]\psi=i\hat{C}\psi \tag{2.64}$$

と書けるが $\hat{C}$ は数になってもよい．書き方を簡単にするために演算子の等式

$$[\hat{A},\hat{B}]=0 \tag{2.65}$$

$$[\hat{A},\hat{B}]=i\hat{C} \tag{2.66}$$

にすることが多い．

例題 $\hat{\boldsymbol{r}}$ と $\hat{\boldsymbol{p}}$ の間につぎの交換関係が成り立つことを確かめよ．

(1) $[\hat{x},\hat{p}_x]=[\hat{y},\hat{p}_y]=[\hat{z},\hat{p}_z]=i\hbar$

(2) $[\hat{x},\hat{p}_y]=[\hat{x},\hat{p}_z]=[\hat{y},\hat{p}_x]=[\hat{y},\hat{p}_z]=[\hat{z},\hat{p}_x]=[\hat{z},\hat{p}_y]=0$

解 (1) $[\hat{x},\hat{p}_x]\psi(x,t)=\dfrac{\hbar}{i}x\dfrac{\partial}{\partial x}\psi(x,t)-\dfrac{\hbar}{i}\dfrac{\partial}{\partial x}[x\psi(x,t)]=i\hbar\psi(x,t)$

$$\therefore\quad [\hat{x},\hat{p}_x]=i\hbar$$

その他についても同様．

(2) $[\hat{x},\hat{p}_y]\psi(x,t)=\dfrac{\hbar}{i}x\dfrac{\partial}{\partial y}\psi(x,t)-\dfrac{\hbar}{i}\dfrac{\partial}{\partial y}[x\psi(x,t)]=0$

その他についても同様． ▮

座標 x,y,z を r_i $(i=1,2,3)$ で表すと，一般に，

$$[\hat{r}_i,\hat{r}_j]=0,\quad [\hat{p}_i,\hat{p}_j]=0,\quad [\hat{r}_i,\hat{p}_j]=i\hbar\delta_{ij}\qquad (i,j=1,2,3) \tag{2.67}$$

を得る.

2.6 定 常 状 態

Schrödinger 方程式は，ポテンシャル $V(\boldsymbol{r})$ が時間に無関係な場合にはかなり簡単化できる．すなわち，ハミルトニアン

$$\hat{H}=-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta+V(\boldsymbol{r})$$

が時間を陽に含んでないので，変数分離した解

$$\psi(\boldsymbol{r}, t)=f(t)\varphi(\boldsymbol{r}) \tag{2.68}$$

を仮定できる．この積の形を Schrödinger 方程式(2.37)に代入し，両辺を $f(t)\varphi(\boldsymbol{r})$ で割ると，

$$\frac{i\hbar}{f(t)}\frac{df(t)}{dt}=\frac{1}{\varphi(\boldsymbol{r})}\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\varphi(\boldsymbol{r})+V(\boldsymbol{r})\varphi(\boldsymbol{r})\right] \tag{2.69}$$

が得られる．(2.69)の左辺は t だけに，右辺は $\boldsymbol{r}$ だけに関係しているから両辺とも同じ１つの定数に等しくなければならない．これはエネルギーの次元をもっているので E とおくと，f に対する方程式はすぐに積分できて，

$$f(t)=\exp\left(-\frac{iEt}{\hbar}\right) \tag{2.70}$$

となる．他方 $\varphi(\boldsymbol{r})$ に対する方程式は，

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\varphi(\boldsymbol{r})+V(\boldsymbol{r})\varphi(\boldsymbol{r})=E\varphi(\boldsymbol{r}) \tag{2.71}$$

となり，これを時間を含まない Schrödinger 方程式とよぶ．(2.71)はハミルトニアンの固有値 E を決める．したがって，波動方程式の特解である**定常解**は，

$$\psi(\boldsymbol{r}, t)=\exp\left(-\frac{iEt}{\hbar}\right)\varphi(\boldsymbol{r}) \tag{2.72}$$

となる．この $\psi(\boldsymbol{r}, t)$ に対しては $|\psi(\boldsymbol{r}, t)|^2=|\varphi(\boldsymbol{r})|^2$ なので各点ごとの粒子存在確率は時間に無関係になる．したがってエネルギーが確定値 E をとる状態を**定常状態**という．

量子力学における定常状態は，以下にあげるような種々の特殊な性質をもつ．

1. 定常状態では定数 E の値は実数である．

例題 1　連続の方程式を用いて上記１の性質を証明せよ．

解　(2.72)で E を一般に複素数とすれば，

$$\rho(\boldsymbol{r}, t)=\psi^*(\boldsymbol{r}, t)\psi(\boldsymbol{r}, t)=\exp\left[-\frac{i}{\hbar}(E-E^*)t\right]\varphi^*(\boldsymbol{r})\varphi(\boldsymbol{r}) \tag{2.73}$$

これを(2.47)の連続の方程式に代入し，全空間で積分すると，

$$-\frac{i}{\hbar}(E-E^*)\int\psi^*(\boldsymbol{r},t)\psi(\boldsymbol{r},t)d^3r=-\int\nabla\boldsymbol{j}(\boldsymbol{r},t)d^3r$$
$$=-\int\boldsymbol{j}_n(\boldsymbol{r},t)dS$$

を得る．右辺の表面積分は0になるので $E=E^*$，つまりEは実数でなければならない． ▮

2. 定常状態では確率密度および確率の流れの密度は時間に依存しない．
3. 定常状態では任意の物理量 A の期待値 $\langle A\rangle$ は，その演算子 $\hat{A}$ が陽に時間によらなければ一定である．

例題 2　1の性質を使って上記2，3の性質を証明せよ．

ヒント　$|f(t)|^2=1$．各自試みて欲しい．

4. 定常状態では $\nabla\cdot\boldsymbol{j}=0$ である．

本節ですでに述べたように，時間を含まない Schrödinger 方程式(2.71)は，いわゆる固有値方程式である．したがって固有値Eと固有関数 $\varphi(\boldsymbol{r})$ を求めなくてはならない．説明をやさしくするために，$\boldsymbol{r}\to\infty$ のとき $V(\boldsymbol{r})\to 0$ と仮定しよう．エネルギー固有値のスペクトルは，とびとびのこともあるし連続的なこともありうる．

束縛状態

$E<0$ ならば，(2.71)はEのある特別な値に対してだけ解をもち，それらの値はとびとびのスペクトルをつくる(95ページの［問題2］参照)．それらの値に対応する定常状態には，いつも系の空間の有限な範囲内での運動が対応している．実際とびとびのEに対する固有関数では $\int|\psi|^2d^3r=\int|\varphi|^2d^3r$ が有限となる．これは $r\to\infty$ で $\varphi(r)\to 0$ になることを意味する．このような粒子は**束縛状態**にあるという．すべての可能な値のなかで最低のエネルギーをもつ定常状態は系の**基底状態**とよばれる．

これは束縛状態のエネルギーの量子化であり基本的な重要性をもっている．原子のエネルギー準位の量子化は，古典的概念の変更を余儀なくさせた事実のうちで最も顕著な実験的事実の1つであるからである．

連続スペクトル

$E>0$ ならば，方程式(2.71)はEのどんな正の値に対しても解をもつ．すなわち正のエネルギーは連続スペクトルをつくる．しかし，この場合の波動関数では，$\int|\psi|^2d^3r$ が発散する．これは $|\psi|^2$ が無限遠で0にならないことと関連して起こる．このように連続スペクトルの場合には，系の無限遠への運動が対応している．

この型の波動関数は衝突の問題を記述するのに役にたつ(第12章参照).

波動方程式の一般解

Schrödinger 方程式(2.37)は線型だから，(2.71)がとびとびのスペクトルをもつとき，その一般解は定常解の重ね合わせとして，

$$\psi(\boldsymbol{r}, t)=\sum c_n \exp\left(-\frac{iE_n t}{\hbar}\right)\varphi_n(\boldsymbol{r}) \tag{2.74}$$

の形に表すことができる．(2.71)の固有値が連続スペクトルであるならば，

$$\psi(\boldsymbol{r}, t)=\int c(E)\exp\left(-\frac{iEt}{\hbar}\right)\varphi_E(\boldsymbol{r})d^3r \tag{2.75}$$

という形に書くことができる.

(2.74)，(2.75)の状態は定まったエネルギーをもたない．したがって定常状態ではない. これらの状態でのエネルギーの期待値は時間にはよらない. たとえば(2.74)の状態では,

$$\langle E\rangle=\int\psi^*(\boldsymbol{r}, t)\hat{H}\psi(\boldsymbol{r}, t)d^3r=\sum_n|c_n|^2E_n \tag{2.76}$$

となる．しかし確率密度は t に依存し,

$$\begin{aligned}\rho(\boldsymbol{r}, t)&=\psi^*(\boldsymbol{r}, t)\psi(\boldsymbol{r}, t)\\&=\sum_{m,n}c_m{}^*c_n\exp\left(\frac{i(E_m-E_n)}{\hbar}t\right)\varphi_m{}^*(\boldsymbol{r})\varphi_n(\boldsymbol{r})\end{aligned}$$

となる．(2.75)の場合も同様である.

2.7 Ehrenfest の定理と古典的極限

Schrödinger 方程式の正しさは，それによって得られた結論がすべて実験と一致することによって立証されるが，ここではそれが古典力学とどういう関係にあるかを示すことにしよう．たとえば，広い空間における電子やその他の荷電粒子が古典力学の法則に従っていることは波動力学ではどのように理解できるのであろうか.

Ehrenfest の定理

2.5節において，量子系の座標 $\boldsymbol{r}$ の期待値とそれに共役な運動量 $\boldsymbol{p}$ の期待値とが，時間とともにどのように変化するかを計算し，(2.53)，(2.58)よりそれぞれ,

$$\frac{d}{dt}\langle\boldsymbol{r}\rangle=\frac{1}{m}\langle\boldsymbol{p}\rangle \tag{2.77 a}$$

$$\frac{d}{dt}\langle\boldsymbol{p}\rangle=-\langle\nabla V(\boldsymbol{r})\rangle=\langle F(\boldsymbol{r})\rangle \tag{2.77 b}$$

の2つの方程式を得た．これらは古典論の運動方程式

$$\frac{d\boldsymbol{r}}{dt}=\frac{1}{m}\boldsymbol{p} \tag{2.78 a}$$

$$\frac{d\boldsymbol{p}}{dt}=-\nabla V(\boldsymbol{r}) \tag{2.78 b}$$

とよく似ている．$\langle \boldsymbol{r} \rangle$ と $\langle \boldsymbol{p} \rangle$ が時間とともにどのように変化するかという関係(2.77 a)，(2.77 b)を Ehrenfest の定理という．(2.77 a)，(2.77 b)を用いると容易に，

$$m\frac{d^2}{dt^2}\langle \boldsymbol{r} \rangle=-\langle \nabla V(\boldsymbol{r}) \rangle=\langle F(\boldsymbol{r}) \rangle \tag{2.79}$$

が得られる．これはポテンシャル $V(\boldsymbol{r})$ のなかでの古典粒子の運動方程式

$$m\frac{d^2}{dt^2}\boldsymbol{r}=-\nabla V(\boldsymbol{r})=F(\boldsymbol{r}) \tag{2.80}$$

に形式的にとてもよく似ている．しかし，これは似て非なるもので古典方程式と同じものではない．

波動力学の古典的極限

それではどのような条件の下に同等になるのであろうか．いま，粒子の状態を記述する波動関数 $\psi(\boldsymbol{r}, t)$ を 2.1 節で議論してきたような波束であると仮定しよう．もちろんここでは確率波としての波束である．$\langle \boldsymbol{r} \rangle$ を波束の中心と考えた場合[1)]，波束の中心の運動が古典力学の法則に従うのはどのような場合であろうか．それを調べるには Ehrenfest の定理を使えばよい．(2.77 a)は波束の中心の速度が波束の平均の運動量を m でわった量に等しいことを意味する．(2.77 b)の右辺は，ひろがっている波束にわたっての力の平均だから，一般には，

$$\langle \nabla V(\boldsymbol{r}) \rangle \neq \nabla V(\boldsymbol{r}=\langle \boldsymbol{r} \rangle) \tag{2.81}$$

である．

ではつぎに，(2.81)の両辺の等式が成り立つための条件を調べてみよう．本質的な事実を引き出すためには，1 次元の波束 $\psi(x, t)$ を調べてやれば十分である．いま，力を

$$F(x)=-\frac{dV(x)}{dx}=-V'(x) \tag{2.82}$$

とおこう．

例題　いま，ポテンシャルが $V(x)=\lambda x^n$（λ：実数，n は正の整数）で与えられているとき，(2.81)の等式に相当した式

$$\langle V'(x) \rangle = V'(x=\langle x \rangle) \tag{①}$$

が成り立つのはどんな場合か．

---

1)　波束の中心と波束が最大値をとる点とは，一般的には異なっている．しかしながら波束の広がりが十分小さい場合はこの差は問題にならない．

解　$V(x)=\lambda x^n$ のとき，①の左辺は，

$$\langle V'(x)\rangle=\lambda n\langle x^{n-1}\rangle \tag{a}$$

になり，右辺は，

$$[V'(x)]_{x=\langle x\rangle}=\lambda n\langle x\rangle^{n-1} \tag{b}$$

となる．しかし一般には，$\langle x^{n-1}\rangle\neq\langle x\rangle^{n-1}$ である．たとえば，$n=3$ の場合 $\langle x^2\rangle\neq\langle x\rangle^2$ であることは明らかである．しかしながら，$n=1$ または 2 の場合 $\langle x^{n-1}\rangle=\langle x\rangle^{n-1}$ であり，$n=0$ の場合も両辺ともに 0 となるので等式は成り立つ．$n=2$ のときは調和振動子の場合，$n=1$ のときは一様な力の場のなかでの粒子，$n=0$ は自由粒子の場合であって，これらの場合においては波束の中心の運動が古典粒子の運動と厳密に同じである．これらの議論は 3 次元の場合にも容易に拡張される．　▮

これまで議論してきたように，(2.81)の両辺は一般には等しくないが，力が巨視的，つまり $V(\boldsymbol{r})$ の変化が十分にゆるやかならば，波束の中心の運動はほぼ古典的粒子として求めた軌道に一致する．それを示すために(2.81)の左辺を，

$$\begin{aligned}\langle\nabla V(\boldsymbol{r})\rangle&=\int\psi^*(\boldsymbol{r},t)[\nabla V(\boldsymbol{r})]\psi(\boldsymbol{r},t)d^3r\\&=\int|\psi(\boldsymbol{r},t)|^2[\nabla \mathrm{V}(\boldsymbol{r})]d^3r\end{aligned} \tag{2.83}$$

の形に書き，波束が十分に局在していると仮定しよう．$V(\boldsymbol{r})$ の変化が十分にゆるやかであるならば，$|\psi(\boldsymbol{r},t)|^2$ が 0 でない空間の領域では $V(\boldsymbol{r})$ をほぼ一定とみなしてよかろう．そうすると $\boldsymbol{r}=\langle\boldsymbol{r}\rangle$ を中心とするこの領域では，$\nabla V(\boldsymbol{r})$ もほぼ一定とみなしてよい．そこで $\nabla V(\boldsymbol{r}=\langle\boldsymbol{r}\rangle)$ を積分の外に出すと，ψ は規格化されているから残りの積分は 1 になる．したがって十分に局在した波束に対して，

$$\langle\nabla V(\boldsymbol{r})\rangle=\nabla V(\boldsymbol{r}=\langle\boldsymbol{r}\rangle) \tag{2.84}$$

が成り立つ．このようにして，広い空間での電子やその他の荷電粒子の運動を求めるのに古典力学を用いてよい理由も説明できた．また，この議論は，de Broglie 波長がポテンシャルの変化する距離に比較して十分小さいようなマクロな粒子の場合にも，古典力学の運動方程式を用いてよいことを示している．

第2章　章　末　問　題

[1]　1 次元の自由粒子の波動関数は，Schrödinger 方程式

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(x,t)=-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\psi(x,t) \tag{1}$$

の解として与えられる．23 ページの［問題 1］のように，

$$\psi(x,t=0)=\varphi(x)=\frac{1}{(a^2\pi)^{\frac{1}{4}}}\exp\left(\frac{ip_0x}{\hbar}-\frac{x^2}{2a^2}\right) \qquad ②$$

で与えられているとき，波動関数の変化(波束の拡散)を求めよ．

[解]

$$\psi(x,t)=\frac{1}{(2\pi\hbar)^{\frac{1}{2}}}\int\tilde{\psi}(p,t)e^{\frac{i}{\hbar}px}dp \qquad ⓐ$$

によって $\tilde{\psi}(p,t)$ へ Fourier 変換すると，Schrödinger 方程式は，

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\tilde{\psi}(p,t)=\frac{p^2}{2m}\tilde{\psi}(p,t) \qquad ⓑ$$

となる．ゆえに，初期条件 $\tilde{\psi}(p,0)=\tilde{\varphi}(p)$ が与えられれば，1次方程式なので簡単に解けて，

$$\tilde{\psi}(p,t)=\exp\left(-\frac{i}{\hbar}\frac{p^2}{2m}t\right)\tilde{\psi}(p,0)=\exp\left(-\frac{i}{\hbar}\frac{p^2}{2m}t\right)\tilde{\varphi}(p) \qquad ⓒ$$

［問題1］(2)でやったように，

$$\tilde{\varphi}(p)=\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int_{-\infty}^{\infty}\varphi(x)\exp\left(-\frac{ipx}{\hbar}\right)dx=\left(\frac{a}{\hbar\sqrt{\pi}}\right)^{\frac{1}{2}}\exp\left(-\frac{a^2}{2\hbar^2}(p-p_0)^2\right) \qquad ⓓ$$

ⓓをⓒに代入すると，

$$\tilde{\psi}(p,t)=\left(\frac{a}{\hbar\sqrt{\pi}}\right)^{\frac{1}{2}}\exp\left(-\frac{a^2}{2\hbar^2}(p-p_0)^2\right)\exp\left(-\frac{i}{\hbar}\frac{p^2}{2m}t\right) \qquad ⓔ$$

(運動量表示の波束はひろがらないことに注意)

$$\therefore\quad \psi(x,t)=\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int\tilde{\psi}(p,t)\exp\left(\frac{i}{\hbar}px\right)dp$$

$$=\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\left(\frac{a}{\hbar\sqrt{\pi}}\right)^{\frac{1}{2}}\int\exp\left(\frac{i}{\hbar}px-\frac{a^2}{2\hbar^2}(p-p_0)^2-\frac{it}{\hbar}\frac{p^2}{2m}\right)dp \qquad ⓕ$$

計算の結果だけを記すと，

$$\psi(x,t)=\frac{1}{\left[\sqrt{\pi}\left(a+\frac{i\hbar t}{ma}\right)\right]^{\frac{1}{2}}}\exp\left[\frac{a\left(-\frac{x^2}{2a^2}+i\frac{p_0x}{\hbar}-\frac{ip_0{}^2t}{2m\hbar}\right)}{a+\frac{i\hbar t}{ma}}\right] \qquad ⓖ$$

となる．$t=0$ で②と一致する．$|\psi|^2$ を計算してみると，

$$|\psi(x,t)|^2=\frac{1}{\left[\pi\left(a^2+\frac{\hbar^2t^2}{m^2a^2}\right)\right]^{\frac{1}{2}}}\exp\left[-\frac{\left(x-\frac{p_0t}{m}\right)^2}{a^2+\frac{\hbar^2t^2}{m^2a^2}}\right] \qquad ⓗ$$

となる．波束の幅 $a(t)$ は t とともに増し，$a(t)=\sqrt{a^2+\frac{\hbar^2t^2}{m^2a^2}}$ である．

$$\therefore \quad \frac{\text{時刻}\, t\, \text{での波束のひろがり}}{\text{最初の波束のひろがり}} = \frac{a(t)}{a(t=0)} = \sqrt{1+\frac{\hbar^2 t^2}{m^2 a^4}} \qquad ⓘ$$

[2]　$\psi(x, t=0)$ が[1]の②で与えられている．

(1) [1] の結果を用いて $\Delta x(t)$ を求めよ．

(2) [1] で求めた $|\tilde{\psi}(p, t)|^2$ を用いて Δp，ΔE を求めよ．

(3) $\Delta x(t)\cdot\Delta p$ を求めよ．

(4) $\Delta t \equiv \dfrac{\Delta x(t)}{\left|\dfrac{d}{dt}\langle x(t)\rangle\right|}$ と定義したとき，$\Delta t\cdot\Delta E$ を求めよ．

[解]　(1) [1]で求めた $|\psi(x, t)|^2$ (ⓗから) を用いて $\Delta x(t)$ を求めると，

$$\Delta x(t) = \frac{1}{\sqrt{2}}\sqrt{a^2+\frac{\hbar^2 t^2}{m^2 a^2}} \qquad ⓐ$$

(2) $(\Delta p)^2 = \langle p^2\rangle - \langle p\rangle^2$ であるから，[1]で求めたⓔを使って，

$$|\tilde{\psi}(p, t)|^2 = \frac{a}{\hbar\sqrt{\pi}}\exp\left[-\frac{a^2}{\hbar^2}(p-p_0)^2\right]$$

$$\therefore \quad \langle p^n\rangle = \frac{a}{\hbar\sqrt{\pi}}\int_{-\infty}^{\infty} p^n \exp\left[-\frac{a^2}{\hbar^2}(p-p_0)^2\right]dp \qquad ⓑ$$

[問題1]でやったように，$\langle p\rangle = p_0$，$\langle p^2\rangle = p_0{}^2 + \dfrac{\hbar^2}{2a^2}$，$\langle p^4\rangle = p_0{}^4 + \dfrac{3\hbar^2}{a^2}p_0{}^2 + \dfrac{3}{4}\left(\dfrac{\hbar^2}{a^2}\right)^2$

だから，

$$(\Delta p)^2 = p_0{}^2 + \frac{\hbar^2}{2a^2} - p_0{}^2 = \frac{\hbar^2}{2a^2} \qquad ⓒ$$

つぎに ΔE を求めると，

$$\begin{aligned}(\Delta E)^2 &= \left\langle\left(\frac{p^2}{2m}\right)^2\right\rangle - \left\langle\frac{p^2}{2m}\right\rangle^2 = \frac{1}{4m^2}\{\langle p^4\rangle - \langle p^2\rangle^2\} \\ &= \frac{1}{4m^2}\left\{p_0{}^4 + \frac{3\hbar^2}{a^2}p_0{}^2 + \frac{3}{4}\left(\frac{\hbar^2}{a^2}\right)^2 - \left[p_0{}^4 + p_0{}^2\frac{\hbar^2}{a^2} + \frac{1}{4}\left(\frac{\hbar^2}{a^2}\right)^2\right]\right\} \\ &= \frac{1}{4m^2}\cdot\frac{\hbar^2}{a^2}\left(2p_0{}^2 + \frac{\hbar^2}{2a^2}\right) \qquad ⓓ\end{aligned}$$

(3) ⓐ，ⓒより，

$$\Delta x(t)\cdot\Delta p = \frac{\hbar}{2}\sqrt{1+\frac{\hbar^2 t^2}{m^2 a^4}} \gtrsim \frac{\hbar}{2} \qquad ⓔ$$

(4) $\dfrac{d}{dt}\langle x\rangle = v = \dfrac{p_0}{m}$ なので，

$\Delta t = \dfrac{m}{|p_0|}\dfrac{1}{\sqrt{2}}\sqrt{a^2+\dfrac{\hbar^2 t^2}{m^2 a^2}}$，ⓓとあわせて，

$$\Delta t \cdot \Delta E = \frac{\hbar}{2}\sqrt{1+\frac{\hbar^2}{4{p_0}^2\alpha^2}}\sqrt{1+\frac{\hbar^2 t^2}{m^2\alpha^4}} \gtrsim \frac{\hbar}{2} \quad ⓕ$$

［3］ 1次元自由粒子を考える．時刻 $t=0$ で，$\tilde{\psi}(p,0)=\tilde{\varphi}(p)=\dfrac{\alpha^2}{p^2+\alpha^2}$ と与えられたとき，

(1) $|\psi(x,0)|^2$ の形を求めよ．

(2) $\psi(x,0)$ を規格化せよ．

(3) 不確定性 $\Delta x \cdot \Delta p$ を計算し，α の値にはよらないことも確かめよ．

［解］ (1) $\psi(x,0)=\dfrac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\displaystyle\int\tilde{\psi}(p,0)\exp\left(\frac{ipx}{\hbar}\right)dp=\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\alpha^2}{p^2+\alpha^2}\exp\left(\frac{ipx}{\hbar}\right)dp$

$$=\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}(\pi\alpha)\exp\left(-\frac{\alpha}{\hbar}x\right)$$

規格化定数 N を用いて，

$$\psi(x,0)=N\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}(\pi\alpha)\exp\left(-\frac{\alpha}{\hbar}|x|\right) \quad ⓐ$$

$$\therefore \quad |\psi(x,0)|^2=N^2\frac{(\pi\alpha)^2}{2\pi\hbar}\exp\left(-\frac{2\alpha}{\hbar}|x|\right) \quad ⓑ$$

(2) 規格化の条件は，

$$\int_{-\infty}^{\infty}|\psi(x,0)|^2dx=2\int_0^{\infty}|\psi(x,0)|^2dx=2N^2\frac{(\pi\alpha)^2}{2\pi\hbar}\int_0^{\infty}\exp\left(-\frac{2\alpha}{\hbar}x\right)dx=1 \quad ⓒ$$

$\displaystyle\int_0^{\infty}e^{-\frac{2\alpha}{\hbar}x}dx=\frac{\hbar}{2\alpha}$ をⓒに代入すると，$N^2=\dfrac{2}{\pi\alpha}$　　$\therefore \quad N=\sqrt{\dfrac{2}{\pi\alpha}}$

$$\therefore \quad \psi(x,0)=\sqrt{\frac{\alpha}{\hbar}}\exp\left(-\frac{\alpha}{\hbar}|x|\right) \quad ⓓ$$

(3) $(\Delta x)^2=\langle x^2\rangle-\langle x\rangle^2=\langle x^2\rangle$

$$=2\int_0^{\infty}x^2|\psi(x,0)|^2dx=\frac{2\alpha}{\hbar}\int_0^{\infty}x^2\exp\left(-\frac{2\alpha}{\hbar}x\right)dx=\frac{\hbar^2}{2\alpha^2}$$

$(\Delta p)^2=\langle p^2\rangle-\langle p\rangle^2=\langle p^2\rangle$

$$=\int_{-\infty}^{\infty}p^2|\tilde{\varphi}(p)|^2dp=N^2\alpha^4\int_{-\infty}^{\infty}\frac{p^2}{(p^2+\alpha^2)^2}dp$$

$$=\frac{2}{\pi\alpha}\cdot\alpha^4\frac{\pi}{2}\frac{1}{\alpha}=\alpha^2$$

$$\therefore \quad (\Delta x)^2(\Delta p)^2=\frac{\hbar^2}{2\alpha^2}\cdot\alpha^2=\frac{\hbar^2}{2}$$

$$\therefore \quad \Delta x\cdot\Delta p=\frac{\hbar}{\sqrt{2}} \quad ⓔ$$

α の値には依存しないことも確かめられた．

［4］　不確定性関係を用いて，つぎの系の基底状態のエネルギーを概算せよ．

(1) 井戸型ポテンシャル $V(x)=\infty \quad (|x|>a), \ =0 \quad (|x|<a)$

のなかに閉じ込められた粒子

(2) 大きさ 1Å の原子のなかに閉じ込められた電子

(3) ポテンシャル $V(x)=F|x| \quad (F>0)$ のなかに閉じ込められた粒子

［解］　(1) $\langle x\rangle=\langle p\rangle=0$ であるから $\Delta x\cdot\Delta p\gtrsim\hbar$ を $x\cdot p\gtrsim\hbar$ とおきかえる．

$$E=\frac{p^2}{2m}\geqq\frac{1}{2m}\left(\frac{\hbar}{2a}\right)^2=\frac{\hbar^2}{8ma^2}$$

(2) $E=\dfrac{p^2}{2m}\geqq\dfrac{1}{2m_{\rm e}}\dfrac{\hbar^2}{x^2}$

$m_{\rm e}\simeq0.51\,\mathrm{MeV}\cdot c^{-2}$,　$\hbar c\simeq197\,\mathrm{MeV\cdot fm}$ を用いると，

$$E\geqq\frac{1}{1.02\,\mathrm{MeV}\cdot c^{-2}}\frac{\hbar^2}{(10^5\,\mathrm{fm})^2}=\frac{(\hbar c)^2}{1.02\times10^{10}\,\mathrm{MeV\cdot(fm)^2}}$$

$$=\frac{(197)^2\,[\mathrm{MeV\cdot fm}]^2}{1.02\times10^{10}\,\mathrm{MeV\cdot[fm]^2}}\simeq4\,\mathrm{eV}$$

(3) $x\cdot p\gtrsim\hbar$ とすると，

$$E=\frac{p^2}{2m}+F|x|\gtrsim\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{x^2}+F|x|$$

$$\frac{d}{dx}\left(\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{x^2}+F|x|\right)=-\frac{\hbar^2}{m}\frac{1}{x^3}+F\varepsilon(x)=0 \quad (\varepsilon(x)：符号関数)$$

$\therefore \quad |x|=\left(\dfrac{\hbar^2}{mF}\right)^{\frac{1}{3}}$ のとき極小になり，

$$E\gtrsim\frac{1}{2}\left(\frac{\hbar^2F^2}{m}\right)^{\frac{1}{3}}+\left(\frac{\hbar^2F^2}{m}\right)^{\frac{1}{3}}=\frac{3}{2}\left(\frac{\hbar^2F^2}{m}\right)^{\frac{1}{3}}$$

［5］　ポテンシャル $V(r)=-\dfrac{\alpha}{r^s} \quad (\alpha>0, \ \ s>0)$ のなかで運動する粒子を考える．不確定性関係を用いて，粒子が原点にむかって落下しないための条件を求めよ．

［解］　題意の場合，古典力学ではいくらでもエネルギーの低い状態が存在する．量子力学では，粒子が原点付近に局在すると不確定性関係によって正の運動エネルギーをもつため，基底状態が存在しうる．

角運動量がゼロの場合に考えれば十分である．$r\cdot p_r\gtrsim\hbar$ とすると，

$$H\sim\frac{1}{2m}p_r{}^2-\frac{\alpha}{r^s}\sim\frac{1}{2m}\frac{\hbar^2}{r^2}-\frac{\alpha}{r^s} \qquad ⓐ$$

すなわち，運動エネルギーは正で $r\to0$ のとき，下に有界であるためには，$s\leqq2$ となることが必要であろう．さらに，$s=2$ の場合には，ⓐにおいて，第 1 項のほうが大きくなくてはならないので，

$$s=2, \qquad \alpha \leqq \frac{\hbar^2}{2m} \qquad ⓑ$$

このとき，エネルギー固有値には下限がある．

[6] ビームからの粒子が他の粒子系に吸収される過程を記述するために複素ポテンシャル $V(\boldsymbol{r})=V_r(\boldsymbol{r})-iV_i(\boldsymbol{r})$ を考えよう．

(1) $\dfrac{\partial\rho}{\partial t}$ を計算せよ．

(2) ビームからの粒子の吸収が起こるために $V_i(\boldsymbol{r})$ のみたすべき条件を求めよ．

[解] (1) $\dfrac{\partial\rho}{\partial t}=\psi^*\dfrac{\partial\psi}{\partial t}+\dfrac{\partial\psi^*}{\partial t}\psi$

Schrödinger 方程式(2.42),(2.43)を代入すると，

$$\frac{\partial\rho}{\partial t}=-\frac{\hbar}{2mi}(\psi^*\Delta\psi-\psi\Delta\psi^*)+\frac{1}{i\hbar}\psi^*\psi(V-V^*)$$

$$=-\nabla\cdot\boldsymbol{j}-\frac{2V_i(\boldsymbol{r})}{\hbar}\psi^*\psi \qquad ⓐ$$

(2) ビームからの粒子の吸収が起こるためには，ⓐの右辺第2項が負でなければならない．ゆえに，

$$V_i(\boldsymbol{r})\geqq 0 \qquad ⓑ$$

が成り立たねばならない．

第3章　1次元の量子系

本章では，Schrödinger 方程式が厳密に解ける 1 次元の簡単な系を調べてみよう．1 次元の問題に興味があるのは，この簡単な模型が量子力学的効果のエッセンス，たとえば，粒子の運動における反射現象，共鳴現象，ポテンシャル障壁を透過する現象であるトンネル効果，粒子の束縛エネルギーの量子化などを含んでいるためである．そこで，3.3，3.4 節では一般の場合を含めたポテンシャル障壁によるトンネル効果をとりあげた．3.6 節では，1 次元問題の応用で，量子力学特有の成功を収めた周期的ポテンシャル中での荷電粒子の運動を説明する．そして最後の節で，波束が階段型ポテンシャルで反射される際の反射波束の中心のおくれの現象について議論する．

3.1　1次元 Schrödinger 方程式の一般的性質

質量 m の粒子がポテンシャル $V(x)$ の場のなかにあるとき，その運動の定常状態を決める問題は(第2章2.6節(2.72)のように $\psi(x, t)=e^{-\frac{iEt}{\hbar}}\varphi(x)$ とおいて)エネルギー演算子の固有値を求めること，すなわち，

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\varphi(x)}{dx^2}+V(x)\varphi(x)=E\varphi(x) \tag{3.1}$$

を解くことに帰着する．この方程式は，Sturm-Liouville 型の線型微分方程式である．その解の一般的性質としてまず，つぎの性質をあげることができる．

1次元問題では，離散スペクトルの現れるエネルギー準位は縮退していない．

証明　まず，準位が縮退していると仮定してみよう．つまり，$\varphi_1(x)$ と $\varphi_2(x)$ が同じエネルギー固有値 E をもった2つの異なる固有関数としてみよう．$\varphi_1(x)$，$\varphi_2(x)$ は，それぞれ

$$\frac{d^2\varphi_1(x)}{dx^2}+\frac{2m}{\hbar^2}(E-V(x))\varphi_1(x)=0 \tag{3.2 a}$$

$$\frac{d^2\varphi_2(x)}{dx^2}+\frac{2m}{\hbar^2}(E-V(x))\varphi_2(x)=0 \tag{3.2 b}$$

をみたすので，

$$\frac{1}{\varphi_1}\frac{d^2\varphi_1(x)}{dx^2}=\frac{2m}{\hbar^2}(V-E)=\frac{1}{\varphi_2}\frac{d^2\varphi_2(x)}{dx^2} \tag{3.3}$$

が得られる．したがって，

$$\frac{d^2\varphi_1(x)}{dx^2}\varphi_2-\frac{d^2\varphi_2(x)}{dx^2}\varphi_1=\frac{d}{dx}\left(\frac{d\varphi_1(x)}{dx}\varphi_2-\frac{d\varphi_2(x)}{dx}\varphi_1\right)=0 \tag{3.4}$$

となる．両辺を積分して，

$$\frac{d\varphi_1(x)}{dx}\varphi_2-\frac{d\varphi_2(x)}{dx}\varphi_1=(\text{定数})$$

を得る．いま束縛状態を考えているので，無限遠で $\varphi_1=\varphi_2=0$ となり，定数は0でなければならない．したがって，

$$\frac{1}{\varphi_1}\frac{d\varphi_1(x)}{dx}=\frac{1}{\varphi_2}\frac{d\varphi_2(x)}{dx}$$

となり，もう一度積分して $\ln\varphi_1=\ln\varphi_2+c$，つまり $\varphi_1=\varphi_2\times(\text{定数})$ となる．けっきょく2つの関数は本質的には同じであり，異なると仮定したことに矛盾する．　▮

ポテンシャルが $V(x)=V(-x)$ をみたすとき，定常な束縛状態の波動関数は $\varphi(x)=\varphi(-x)$ か $\varphi(x)=-\varphi(-x)$ のどちらかである．

証明 (3.1)において，x を $-x$ でおきかえ，$V(x)=V(-x)$ を使うと，

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\varphi(-x)}{dx^2}+V(x)\varphi(-x)=E\varphi(-x)$$

すなわち，$\varphi(x)$ が固有値 E に属する解であれば，$\varphi(-x)$ も同じ固有値に属する解である．前述したように，離散スペクトルの現れるエネルギー準位は縮退していないから，$\varphi(-x)=c\varphi(x)$，x を $-x$ と書くと $\varphi(x)=c\varphi(-x)$，両式から $\varphi(-x)=c^2\varphi(-x)$． ∴ $c=\pm 1$．したがって，$\varphi(x)=\varphi(-x)$ か $\varphi(x)=-\varphi(-x)$ のどちらかになる． ∎

(3.1)が最も簡単に解けるのは，全空間でポテンシャルエネルギーが一定の場合と，空間の2つの領域でポテンシャルがそれぞれ別の一定値をとり，両区域の境界点 $x=x_1$ で，一方の値から他の値へと不連続に移る場合とである．

ポテンシャルエネルギーが一定の場合の解

井戸型ポテンシャルのような場合には，空間のある領域で $V(x)=V_0$ となる．そのような領域では，(3.1)は，

$$\frac{d^2\varphi(x)}{dx^2}+\frac{2m}{\hbar^2}(E-V_0)\varphi(x)=0 \tag{3.5}$$

となる．

$E>V_0$ の場合，

$$E-V_0=\frac{\hbar^2k^2}{2m} \tag{3.6}$$

で定義されるような k を導入すると，(3.5)の解は，

$$\varphi(x)=Ae^{ikx}+Be^{-ikx} \tag{3.7}$$

$E<V_0$ の場合，

$$V_0-E=\frac{\hbar^2\rho^2}{2m} \tag{3.8}$$

で定義されるような ρ を導入すると，(3.5)の解は，

$$\varphi(x)=Ce^{\rho x}+De^{-\rho x} \tag{3.9}$$

となる．

ポテンシャルが有限のとびをもつときの $\varphi(x)$ のふるまい

ポテンシャル $V(x)$ が $x=x_1$ で有限の不連続性をもつときも，波動関数の1階微分 $\dfrac{d}{dx}\varphi(x)$ と波動関数 $\varphi(x)$ は連続である．

証明 数学的厳密さを追求せず，直観的に考えよう．図3.1に示すように，$V(x)$ が $x=x_1$ で有限のとびをもつとき，まず区間 $(x_1-\varepsilon, x_1+\varepsilon)$ で点線に変更したabcd

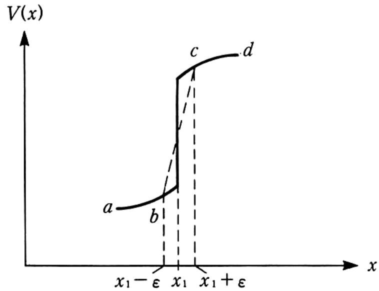


図 3.1

の形のポテンシャル $V_\varepsilon(x)$ $\left(\lim_{\varepsilon\to 0} V_\varepsilon(x)=V(x)\right)$ を考える．$V_\varepsilon(x)$ が有界のとき，方程式

$$\frac{d^2\varphi_\varepsilon(x)}{dx^2}+\frac{2m}{\hbar^2}(E-V_\varepsilon(x))\varphi_\varepsilon(x)=0 \tag{3.10}$$

を考えよう．確率密度は有限なので，$\varphi_\varepsilon(x)$ は有界であり，かつ $\lim_{\varepsilon\to 0}\varphi_\varepsilon(x)=\varphi(x)$ と考えてよい．区間 $(x_1-\delta, x_1+\delta)$ で両辺を積分すると，

$$\int_{x_1-\delta}^{x_1+\delta}\frac{d^2\varphi_\varepsilon(x)}{dx^2}dx=\frac{d\varphi_\varepsilon(x_1+\delta)}{dx}-\frac{d\varphi_\varepsilon(x_1-\delta)}{dx}=\frac{2m}{\hbar^2}\int_{x_1-\delta}^{x_1+\delta}(V_\varepsilon(x)-E)\varphi_\varepsilon(x)dx$$

ε を 0 に近づけても，右辺の被積分関数は有界であるから，$\delta\to 0$ で積分の値は 0 になる．すなわち，$\delta\to 0$ で，

$$\lim_{\delta\to 0}\frac{d\varphi(x_1+\delta)}{dx}=\lim_{\delta\to 0}\frac{d\varphi(x_1-\delta)}{dx} \tag{3.11}$$

となる．したがって，$\dfrac{d}{dx}\varphi(x)$ は $x=x_1$ で連続である．もう一回積分して，$\varphi(x)$ は $x=x_1$ でさらになめらかになる．　∎

定常状態の決め方

したがって，階段型ポテンシャルで定常状態を決めるには，つぎのようにすればよい．まず，$V(x)$ が一定のすべての領域において，解を(3.7)，(3.9)の形に書く．つぎに $V(x)$ に有限の不連続性をもつ点で $\varphi(x)$, $\dfrac{d}{dx}\varphi(x)$ の連続性を要求すればよい．ポテンシャルが δ 関数のようにふるまうときには，つぎの[問題 1]のような議論ができる．

[問題 1]　ポテンシャルが $V(x-x_1)=V_0\delta(x-x_1)$ の形であるとき，$\dfrac{d}{dx}\varphi(x)$

と $\varphi(x)$ はどのようにふるまうであろうか．

［解］ Schrödinger 方程式は，

$$\frac{d^2\varphi(x)}{dx^2}+\frac{2m}{\hbar^2}(E-V_0\delta(x-x_1))\varphi(x)=0$$

である．この方程式を $x=x_1$ を含む非常に狭い範囲 $(x_1+\delta,\ x_1-\delta)$ で積分すれば，

$$\frac{d\varphi(x_1+\delta)}{dx}-\frac{d\varphi(x_1-\delta)}{dx}=\frac{2m}{\hbar^2}\int_{x_1-\delta}^{x_1+\delta}(V_0\delta(x-x_1)-E)\varphi(x)dx$$

$\delta\to 0$ で，$\left(\frac{d\varphi}{dx}\right)_{x_1+}-\left(\frac{d\varphi}{dx}\right)_{x_1-}=\frac{2m}{\hbar^2}V_0\varphi(x_1)$ となる．したがって，$\frac{d}{dx}\varphi(x)$ は $x=x_1$ でとびをもつ．積分することにより φ は連続となる． ▮

3.2　波動の反射と透過

実際に，いくつかの階段型ポテンシャルの例について固有値問題を解いていこう．

簡単な階段型ポテンシャル

最も簡単な例は，ポテンシャルに1回だけとびがあるもので，そのポテンシャルは，図3.2に示すように領域1 $(x<0)$ で $V(x)=0$，領域2 $(x>0)$ で $V(x)=V_0$ となる．Schrödinger 方程式は(3.5)で与えられる．

(i) $E>V_0$ のとき，

$$\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}=k_1 \tag{3.12}$$

$$\sqrt{\frac{2m(E-V_0)}{\hbar^2}}=k_2 \tag{3.13}$$

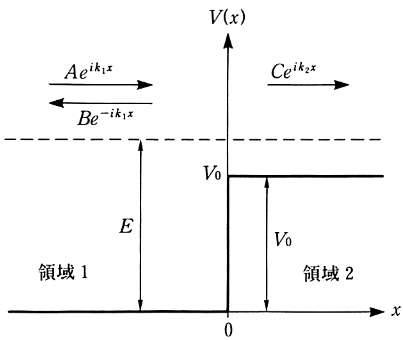


図3.2

とおき，入射波が $x=-\infty$ から右に進む場合を考える．領域1での一般解は，

$$\varphi_1(x)=Ae^{ik_1x}+Be^{-ik_1x} \tag{3.14}$$

となる．第1項は $e^{-\frac{iEt}{\hbar}}$ が常にかかっているので，左から右に進む入射波を表し，第2項は逆方向に進む反射波を表す．領域2での一般解は，

$$\varphi_2(x)=Ce^{ik_2x}+De^{-ik_2x} \tag{3.15}$$

となり，第2項は $x=+\infty$ から左方向に進む波を表すので，いまの実験では考えられず，$D=0$ となる．

$x=0$ で解をなめらかにつなぐ条件は，

$$\varphi_1(0)=\varphi_2(0) \text{ より} \qquad A+B=C \tag{3.16}$$

$$\varphi_1'(0)=\varphi_2'(0) \text{ より} \qquad k_1A-k_1B=k_2C \tag{3.17}$$

であるから，B/A，C/A について解くと，

$$\frac{B}{A}=\frac{k_1-k_2}{k_1+k_2} \tag{3.18}$$

$$\frac{C}{A}=\frac{2k_1}{k_1+k_2} \tag{3.19}$$

となる．

さて，波動関数が求まると，確率の流れの密度は(2.44)で与えられる．したがって，(3.14)の場合には，

$$\begin{aligned} j&=\frac{\hbar}{2im}\left(\varphi_1{}^*\frac{d\varphi_1}{dx}-\frac{d\varphi_1{}^*}{dx}\varphi_1\right)\\ &=\frac{1}{m}\mathrm{Re}\left(\varphi_1{}^*\frac{\hbar}{i}\frac{d\varphi_1}{dx}\right)\\ &=\frac{\hbar k_1}{m}(|A|^2-|B|^2)=j_{\mathrm{inc}}-j_{\mathrm{refl}} \end{aligned} \tag{3.20}$$

となり，(3.15)の場合は，

$$j=\frac{\hbar k_2}{m}|C|^2=j_{\mathrm{trans}} \tag{3.21}$$

となる．j_{inc} は入射確率密度流，j_{refl} は反射確率密度流，j_{trans} が透過確率密度流を表す．したがって，

$$\text{反射率 } R=\frac{j_{\mathrm{refl}}}{j_{\mathrm{inc}}}=\frac{|B|^2}{|A|^2} \tag{3.22}$$

$$\text{透過率 } T=\frac{j_{\mathrm{trans}}}{j_{\mathrm{inc}}}=\frac{k_2}{k_1}\frac{|C|^2}{|A|^2} \tag{3.23}$$

(3.18)，(3.19)を使うと，

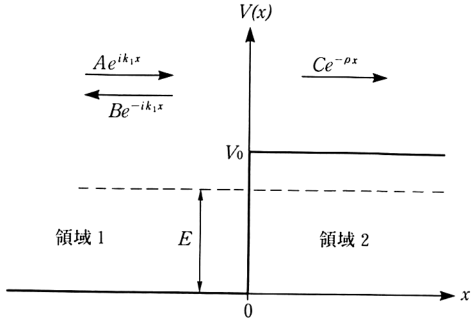


図 3.3

$$R=\left(\frac{k_1-k_2}{k_1+k_2}\right)^2=1-\frac{4k_1k_2}{(k_1+k_2)^2}$$

$$T=\frac{k_2}{k_1}\frac{4k_1{}^2}{(k_1+k_2)^2}=\frac{4k_1k_2}{(k_1+k_2)^2}$$

$$\therefore \quad R+T=1 \tag{3.24}$$

が成り立つ．注意すべきことを以下にあげておく．

(1) $E>V_0$ のとき，古典力学では，$x=0$ で粒子の速度は遅くなるのみで反射されなかったが，量子力学では一部が反射される．これはもちろん，粒子の波動性の結果である．

(2) $E\gg V_0$ のとき，k_2 は k_1 に近づき R は 0 に近づく．これは直観とも一致しており，階段の存在は単に摂動としてのみ働くのである．

(3) $E=V_0$ のとき，$k_2/k_1=0$．　$\therefore$　$T=0$，$R=1$ となる．

(ii) $E<V_0$ のとき，図 3.3 の領域 1 における一般解は(3.14)で与えられるが，領域 2 では，

$$\frac{\hbar^2\rho^2}{2m}=V_0-E>0 \tag{3.25}$$

を使って Schrödinger 方程式は，

$$\varphi''=\rho^2\varphi \tag{3.26}$$

したがって，

$$\varphi_2=Ce^{-\rho x} \tag{3.27}$$

となる．すなわち，古典力学では禁止された領域であるが，量子力学では障壁にしみ込むことができる．

$x=0$ で解をつなぐ条件は，

$$\varphi_1(0)=\varphi_2(0) \quad より \quad A+B=C$$
$$\varphi_1'(0)=\varphi_2'(0) \quad より \quad k_1A-k_1B=i\rho C$$

となり，B/A，C/A について解くと，

$$\frac{B}{A}=\frac{k_1-i\rho}{k_1+i\rho} \tag{3.28}$$

$$\frac{C}{A}=\frac{2k_1}{k_1+i\rho} \tag{3.29}$$

$$\therefore \quad R=\left|\frac{B}{A}\right|^2=1 \tag{3.30}$$

となる．

例題　$T=0$ を示せ．

解　j_{trans} を計算すると，

$$j_{\text{trans}}=\frac{|C|^2}{m}\text{Re}\left(\frac{-\hbar}{i}\rho e^{-2\rho x}\right)=0$$

$$\therefore \quad T=\frac{j_{\text{trans}}}{j_{\text{inc}}}=0 \quad ▮$$

1. このように $R=1$，$T=0$ なので古典力学のときと同様に，粒子は完全に反射され，透過波は存在しない．しかし，$\varphi_2(x)=A\dfrac{2k_1}{k_1+i\rho}e^{-\rho x}$ なので，古典論では禁止された領域へも一部にじみ出る．つまり，$x>0$ で粒子を見い出す確率は 0 ではない．しかし，例題でわかったように j_{trans} を計算すると 0 となるので，透過するフラックスは存在しない．

2. 古典論では，$x=-\infty$ から右の方向に粒子が飛んできて，$x=0$ で弾性的に瞬時にはね返される．量子力学では，波束を作って考えると，入射波束の中心は古典論の粒子とほとんど同じで，$t=0$ に $x=0$ に到着する．ただ 1 つの違いは，$x=0$ で反射される際に，波束の中心は少しばかりおくれを生ずる．これは，$x\geqq 0$ の領域に粒子が存在する確率が 0 ではないので，反射される前にここでひとときを過ごすために少しおくれるのである（3.8 節参照）．

［問題 2］　図 3.3 において，$E<V_0$ の電子が $x=-\infty$ から右に進む場合を考える．

(1) 古典的に禁止された領域 $x>0$ に粒子を見い出す確率が，$x=0$ での値の $1/e$ に減る距離 Δx を計算せよ．

(2) $V_0=10$ eV, $E=6$ eV のとき，Δx は何 Å になるか．

［解］　(1)（3.27）より，

$$\frac{|\varphi_2(\Delta x)|^2}{|\varphi_2(0)|^2}=e^{-2\rho\Delta x}=e^{-1}$$

$$\therefore\quad \Delta x=\frac{1}{2\rho}=\frac{1}{2}\frac{\hbar}{\sqrt{2m(V_0-E)}} \tag{ⓐ}$$

(2) ⓐの分子，分母に c をかけて，

$m=0.51\ \mathrm{MeV}/c^2$, $V_0-E=4\ \mathrm{eV}$, $\hbar c=197\ \mathrm{MeV\cdot fm}$ を代入すると，

$$\Delta x=\frac{1}{2}\frac{197\ \mathrm{MeV\cdot fm}}{\sqrt{2\times0.51\mathrm{MeV}\times4\times10^{-6}\ \mathrm{MeV}}}$$
$$=4.88\times10^{-9}\ \mathrm{cm}=0.488\ \text{Å}$$

（注 .オーダーを評価するときには，$\hbar c\approx200\ \mathrm{MeV\cdot fm}$ を使うと便利である）∎

［問題 3］　任意の1次元ポテンシャル障壁において，$T+R=1$ の関係が成り立つことを示せ．

［解］　この1次元の散乱は定常状態にあるから，連続の方程式は，$\dfrac{dj}{dx}=0$ となる．

$$\therefore\quad \int_{-\infty}^{\infty}\frac{dj}{dx}dx=j(+\infty)-j(-\infty)=0$$

ところで，(3.20)で示したように，$j(-\infty)=j_{\mathrm{inc}}-j_{\mathrm{refl}}$ であり，また $j(+\infty)=j_{\mathrm{trans}}$ だから，

$$j_{\mathrm{inc}}-j_{\mathrm{refl}}=j_{\mathrm{trans}}$$

$$\therefore\quad \frac{j_{\mathrm{trans}}}{j_{\mathrm{inc}}}+\frac{j_{\mathrm{refl}}}{j_{\mathrm{inc}}}=1,\qquad \therefore\quad T+R=1 \quad ∎$$

［問題 4］　運動エネルギー E をもった中性子が，$x<0$ のとき $V(x)=0$，$x>0$ のとき $V(x)=-V_0$ で与えられる1次元模型の原子核ポテンシャルに $x=-\infty$ から入射する．この中性子が原子核の表面で反射される確率を計算せよ．ただし，$E=5\ \mathrm{MeV}$, $V_0=60\ \mathrm{MeV}$ とする．

［解］

$$R=\left(\frac{k_1-k_2}{k_1+k_2}\right)^2=\left(\frac{\sqrt{E}-\sqrt{E+V_0}}{\sqrt{E}+\sqrt{E+V_0}}\right)^2$$
$$=\left(\frac{\sqrt{5}-\sqrt{65}}{\sqrt{5}+\sqrt{65}}\right)^2$$
$$=0.32 \quad ∎$$

3.3　ポテンシャル障壁とトンネル効果 I — 長方形ポテンシャル障壁

エネルギー E の粒子(質量 m)が，図3.4のような長方形のポテンシャル障壁に

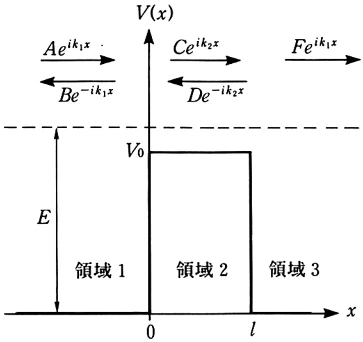


図 3.4

入射する場合を考えてみよう．

(i) $E > V_0$ の場合

(3.12)，(3.13) を使って Schrödinger 方程式 (3.5) を解くと，領域 1 ($x<0$) における一般解は，

$$\varphi_1(x) = Ae^{ik_1x} + Be^{-ik_1x} \tag{3.31}$$

領域 2 ($l > x > 0$) では，

$$\varphi_2(x) = Ce^{ik_2x} + De^{-ik_2x} \tag{3.32}$$

領域 3 ($x > l$) では，

$$\varphi_3(x) = Fe^{ik_1x} \tag{3.33}$$

となる．したがって，$x=0$ で解をつなぐ条件は，

$$A + B = C + D, \tag{3.34}$$

$$k_1A - k_1B = k_2C - k_2D \tag{3.35}$$

である．同様にして $x=l$ で，

$$Ce^{ik_2l} + De^{-ik_2l} = Fe^{ik_1l}, \tag{3.36}$$

$$k_2(Ce^{ik_2l} - De^{-ik_2l}) = k_1Fe^{ik_1l} \tag{3.37}$$

を得る．(3.36)，(3.37) より，

$$C = \frac{k_1 + k_2}{2k_2} e^{i(k_1 - k_2)l} F, \tag{3.38}$$

$$D = \frac{k_2 - k_1}{2k_2} e^{i(k_1 + k_2)l} F, \tag{3.39}$$

(3.34)，(3.35) より，

$$A = \frac{(k_1 + k_2)C + (k_1 - k_2)D}{2k_1} \tag{3.40}$$

$$B=\frac{(k_1-k_2)C+(k_1+k_2)D}{2k_1} \tag{3.41}$$

となり，(3.40)，(3.41)に(3.38)，(3.39)を代入すると，

$$A=\left[\cos(k_2l)-i\frac{k_1^2+k_2^2}{2k_1k_2}\sin(k_2l)\right]e^{ik_1l}F \tag{3.42}$$

$$B=i\frac{k_2^2-k_1^2}{2k_1k_2}\sin(k_2l)e^{ik_1l}F \tag{3.43}$$

が得られる．したがって，

$$\text{反射率}\ R=\frac{|B|^2}{|A|^2}=\frac{(k_2^2-k_1^2)^2\sin^2(k_2l)}{4k_1^2k_2^2+(k_1^2-k_2^2)^2\sin^2(k_2l)} \tag{3.44}$$

$$\text{透過率}\ T=\frac{|F|^2}{|A|^2}=\frac{4k_1^2k_2^2}{4k_1^2k_2^2+(k_1^2-k_2^2)^2\sin^2(k_2l)} \tag{3.45}$$

が求まる．(3.44)，(3.45)より $R+T=1$ は明らかである．つぎに k_1，k_2 を E と V_0 で表すと，

$$T=\frac{4E(E-V_0)}{4E(E-V_0)+V_0^2\sin^2(k_2l)}, \tag{3.46}$$

$$R=\frac{V_0^2\sin^2(k_2l)}{4E(E-V_0)+V_0^2\sin^2(k_2l)} \tag{3.47}$$

となる．注意すべき点を以下にあげる．

(1) $E>V_0$ のとき，古典的にはポテンシャル障壁で反射されずに通過するが，量子力学では(3.44)により反射される確率が0ではない．

(2) E，V_0 を固定したとき，k_2l の値によって T，R は振動的に変化し，(3.46)より $\sin^2(k_2l)=0$ のとき，つまり，$k_2l=n\pi$ ($n=1,2,3,\cdots$) のとき，$T=1, R=0$ となり，すべて壁を透過して反射が起こらない．このような一種の共鳴現

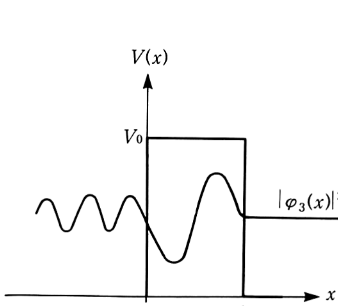


図3.5

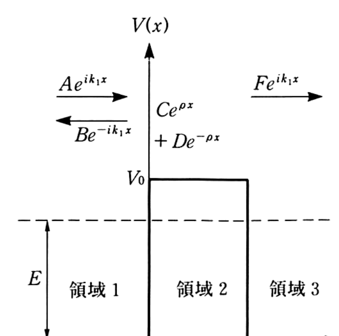


図3.6

象が起こることも量子力学的効果である．これは $l=n(\pi/k_2)=n(\lambda/2)$ $(n=1, 2, 3, \cdots)$ がみたされているとき(半波長の整数倍)であり，障壁内部に定常波が形づくられ，波束は長時間ここですごすことになる．

(3) $E>V_0$ の場合の確率密度をまとめておくと，図 3.5 のようになる．

(ii) $E<V_0$ の場合(トンネル効果，図 3.6)

$E>V_0$ のときの(3.32)を，

$$\varphi_2(x)=Ce^{\rho x}+De^{-\rho x}, \tag{3.48}$$

$$\frac{\hbar^2\rho^2}{2m}=V_0-E \tag{3.49}$$

すなわち，(i)の結果に $ik_2\to\rho$ のおきかえをすればよい．(3.45)で $ik_2\to\rho$ とおくと，

$$T=\frac{4k_1{}^2\rho^2}{4k_1{}^2\rho^2+(k_1{}^2+\rho^2)^2\sinh^2(\rho l)} \tag{3.50}$$

(3.12)，(3.49) を使うと，

$$T=\frac{4E(V_0-E)}{4E(V_0-E)+V_0{}^2\sinh^2\left(\sqrt{\dfrac{2m(V_0-E)}{\hbar^2}}\,l\right)} \tag{3.51}$$

となる．したがって，$E<V_0$ のとき $T<1$ となる．$E\to V_0$ に近づく場合には，特別に注意を要する．

$$\frac{V_0-E}{V_0}=\frac{\hbar^2\rho^2}{2mV_0}\equiv\varepsilon\to 0$$

のとき，$g^2\equiv\dfrac{2ml^2V_0}{\hbar^2}$ とおけば，

$$T=\frac{1}{1+\dfrac{1}{4}g^2}+O(\varepsilon) \tag{3.52}$$

を得る．

(1) したがって，ポテンシャル障壁による散乱では，$E=V_0$ の場合でも $T<1$ となる．

(2) $\rho l\gg 1$ の場合には，$\sinh(\rho l)\simeq e^{\rho l}/2$ であるから，

$$T\simeq\frac{16E(V_0-E)}{V_0{}^2}\exp\left(-\frac{2\sqrt{2m(V_0-E)}\,l}{\hbar}\right) \tag{3.53}$$

このように，$E<V_0$ のとき，古典論では，粒子はポテンシャル障壁を通り抜けることはできないが，量子力学では，(3.53)により透過する確率は 0 ではない．このような量子力学特有の現象を**トンネル効果**という．V_0-E，l が増すと，指数関数の部分が急速に減少し，T は速やかに減少する．$l\lesssim 1/\rho$ ならば，トンネ

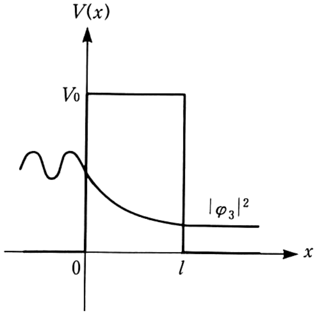


図 3.7

ル効果でポテンシャル障壁を通り抜ける確率は大きくなる．このトンネル効果により，原子核の α 崩壊の現象がはじめて説明されたが，その後 Esaki ダイオード（トンネルダイオード）や Josephson 効果等の理解に役立った．

(3) $E < V_0$ の場合の確率密度は，図 3.7 のようになる．

［問題 5］ (1) ポテンシャル障壁（$V_0 = 3$ eV，$l = 1$ Å）に，左から質量 0.51 MeV/c^2 の電子が，エネルギー $E = 1$ eV で入射してくるときの透過率 T を計算せよ．

(2) 上のポテンシャルで $l = 10$ Å のときはどうなるか．

(3) (1)のポテンシャルに左から電子の質量の 1840 倍の陽子が，同じエネルギー 1 eV で入射してくるときの透過率 T は，いくらになるか．

［解］ (1) (3.53) より，

$$T \simeq \frac{16E(V_0 - E)}{V_0^2} e^{-2\rho l} \tag{a}$$

ただし，

$$\rho = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar} \tag{b}$$

いま，$m = 0.51$ MeV/c^2，$V_0 - E = 2$ eV，$\hbar c \simeq 197$ MeV·fm $= 197$ eV·nm を代入すると，$\rho l = 1.45/2$．$\rho l \gg 1$ ではないので，ⓐは使えないため，(3.51) を使う．$\sinh \rho l = 0.790$ だから，

$$T = \frac{8}{8 + 9(0.79)^2} \simeq 0.59$$

となる．

(2) $2\rho l = 14.5$

$$\therefore \quad e^{-2\rho l}=0.0000005$$

$$\therefore \quad T=0.0000017$$

(3) $2\rho_{\text{proton}}l=62.2$

$$\therefore \quad \exp\left(-2\rho_{\text{proton}}l\right)=9.72\times10^{-28}$$

$$\therefore \quad T=3.46\times10^{-27} \qquad \blacksquare$$

［問題 6］　$l>x>0$ で $V(x)=-|V_0|$，$x>l$ と $x<0$ で $V(x)=0$ の井戸型ポテンシャルによる散乱問題を考えよう ($E>0$).

(1) $E\geqq0$ のときの透過係数 T を計算せよ.

(2) $E=0$ での T の値はいくらか.

(3) エネルギー E を上げていくと，どのエネルギーで $T=1$ になるか.

(4) T を $E/|V_0|$ の関数として概形を書け.

［解］　(1) ポテンシャルは図 3.8 のようになる．図 3.4 における領域 2 で，k_2 を，

$$\frac{\hbar^2 k_2^2}{2m}=E-V_0=E+|V_0| \qquad ⓐ$$

でおきかえればいい．したがって，$E>0$ での透過係数 T は，(3.46) で $V_0\to-|V_0|$ とおきかえると，

$$T=\frac{4E(E+|V_0|)}{4E(E+|V_0|)+V_0^2\sin^2(k_2 l)} \qquad ⓑ$$

となる.

(2) ⓑより，($k_2(E=0)\,l\neq n\pi$ ならば) $E=0$ のとき，$T=0$ となる.

(3) ⓑにおいて $\sin^2(k_2 l)=0$ のとき，$T=1$ となる.

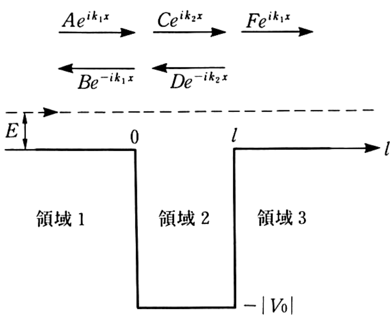


図 3.8

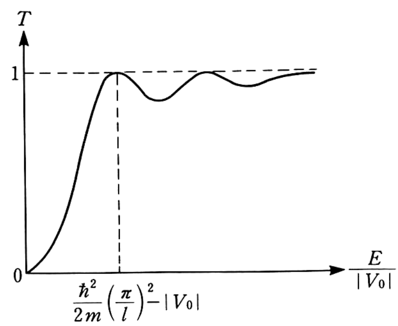


図 3.9

$$\therefore \quad k_2 l = n\pi \qquad (n=1, 2, 3, \cdots)$$

$$\therefore \quad E = \frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{n\pi}{l}\right)^2 - |V_0| \qquad (n=1, 2, 3, \cdots)$$

(4) 61 ページ図 3.9. ∎

3.4　ポテンシャル障壁とトンネル効果 II ― 一般の場合

一般の物理現象では，ポテンシャル障壁の形は長方形とはかぎらない．したがって，もっと一般的な形のポテンシャル障壁の場合の透過係数 T の近似式を求めておこう．

前節でみたように，長方形のポテンシャル障壁(図3.6)に $E < V_0$ のエネルギーの粒子が入射するときには，T は(3.53)より明らかなように，$\rho l \gg 1$ ならば，

$$T \simeq \frac{16\,E(V_0 - E)}{V_0^2} e^{-2\rho l} \tag{3.54}$$

となり，急速に減衰する．

いま，ポテンシャルエネルギーの曲線 $V(x)$ は，十分になめらかであると仮定して，区間 $[a, b]$ を長さ Δx_i の間隔で分割してみよう(図 3.10)．(3.53)は 2 項の積からなっているが，$e^{-2\rho l}$ の項がより重要な項である．すなわち，

$$\log T \simeq -2\,\rho l + \log\frac{16E(V_0 - E)}{V_0^2} \tag{3.55}$$

と書くと，第 1 項が最も重要な役割をはたす．粒子は一定のエネルギー E をもって障壁を通過するから，i 番目の長方形の障壁を通しての透過確率 T_i は，近似的に独立である．実際，長方形の障壁の幅を 2 倍にすると透過確率は 2 乗になる．このことから，全障壁を通じての透過係数は，近似的に，

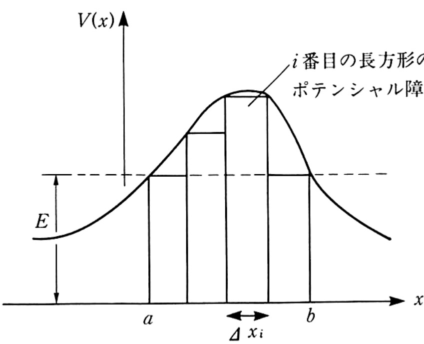


図 3.10

$$\log T \simeq \sum_i \log T_i$$
$$\simeq -2\sum \Delta x\langle\rho\rangle$$
$$\simeq -2\int_a^b dx \frac{\sqrt{2m(V(x)-E)}}{\hbar} \tag{3.56}$$

によって与えられる．Δx は1つの障壁の幅であり，$\langle\rho\rangle$ はその障壁のなかでの ρ の平均値である．ここでつぎのことがらに注意しておこう．

1. この近似は，$E \simeq V(x)$ の古典的には引き返す点(回帰点)の近くではよくない．すなわち，(3.54)は，(3.51)のいい近似にはなっていない．
2. ポテンシャル $V(x)$ は，あまり急激に変化しない関数であることが必要である．そうでないと，長方形の障壁の幅は狭くなければならず，(3.53)がいい近似で成立しないからである．

第10章で述べるWKB法で，古典的回帰点の近くにおけるふるまいを考慮してとりあげるが，やはり同じ結果が得られる．したがって，ゆるやかなポテンシャルの山を透過する率 T は，よい近似で，

$$T \simeq \exp\left[-\frac{2}{\hbar}\int_a^b dx\sqrt{2m(V(x)-E)}\right] \tag{3.57}$$

と与えられる．この式を **Gamov の透過因子**という．

例題 1　$x<0$ で $V(x)=-V_0$，$x>0$ で $V(x)=-e\varepsilon x$ のポテンシャルがある(ε は電場の強さ，e は粒子の電荷)．x の負の側から，エネルギー E $(0>E>-V_0)$ で飛んできた粒子の透過率はいくらか．

解　ポテンシャル(図3.11)において古典的回帰点を 0，b とすると，

$$V(x)-E=-e\varepsilon x+|E|=0$$
$$\therefore\quad b=\frac{|E|}{e\varepsilon} \tag{ⓐ}$$

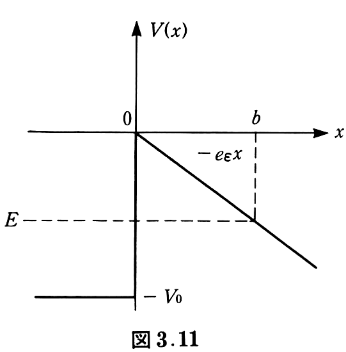


図 3.11

透過率 T は(3.57)より,

$$T \simeq \exp\left[-\frac{2}{\hbar}\int_0^{|E|/e\varepsilon} dx\sqrt{2m(-e\varepsilon x+|E|)}\right] \qquad ⓑ$$

$$\therefore \quad T \simeq \exp\left(-\frac{4\sqrt{2}}{3}\frac{\sqrt{m}}{e\varepsilon\hbar}|E|^{\frac{3}{2}}\right) \quad ∎ \qquad ⓒ$$

トンネル効果は，原子核物理においても重要である．すなわち，**α崩壊の現象**を，α 粒子が原子核によるポテンシャルを貫通する量子力学的な問題としてとらえることができる．α 粒子は，原子核内では，核力によるポテンシャルエネルギーをもち，原子核の外部では Coulomb 力による斥力を感じる．模型を簡単化して，

$r<R$ のとき,

$$V(r)=-V_0$$

$r>R$ のとき,

$$V(r)=\frac{2Ze^2}{r}$$

としよう(図3.12)．ここで，α 粒子の電荷は2であり，Z は α 粒子が放出されたあとの残りの原子核の電荷としよう．この障壁に対する Gamov 因子，すなわち，エネルギー E の α 粒子に対するこの障壁を通しての透過確率 T は,

$$T=\exp\left[-\frac{2}{\hbar}\int_R^b dr\sqrt{2m\left(\frac{2Ze^2}{r}-E\right)}\right] \qquad (3.58)$$

$T=e^{-G}$ とおくと,

$$G=\frac{2}{\hbar}\int_R^b dr\sqrt{2m\left(\frac{2Ze^2}{r}-E\right)} \qquad (3.59)$$

この積分は厳密に求まり,

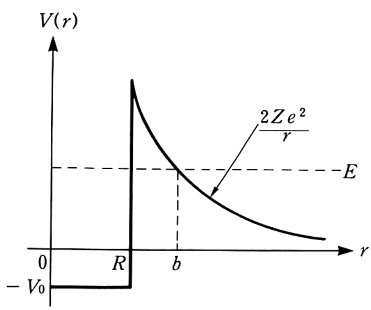


図3.12

$$\int_R^b dr\sqrt{\frac{1}{r}-\frac{1}{b}}=\sqrt{b}\left[\cos^{-1}\sqrt{\frac{R}{b}}-\sqrt{\frac{R}{b}-\frac{R^2}{b^2}}\right] \tag{3.60}$$

となる．

例題2　(3.60)を計算して示せ．

解　変数rを$r=b\cos^2\theta$に変えると，

$$\int_R^b dr\sqrt{\frac{1}{r}-\frac{1}{b}}=2\sqrt{b}\int_0^{\cos^{-1}\sqrt{\frac{R}{b}}}\sin^2\theta\,d\theta$$
$$=\sqrt{b}\left[\cos^{-1}\sqrt{\frac{R}{b}}-\sqrt{\frac{R}{b}-\frac{R^2}{b^2}}\right] \quad ▮$$

$r=R$でのCoulomb障壁の高さに比べてエネルギーEが小さいときには，$b\gg R$となり，

$$G\simeq\frac{2}{\hbar}\sqrt{4mZe^2}\sqrt{b}\times\frac{\pi}{2} \tag{3.61}$$

を得る$\left(ただし\ b=\frac{2Ze^2}{E}\right)$．$\alpha$粒子に対して，$E=\frac{1}{2}mv^2$とおけば，

$$G\simeq\frac{4\pi Ze^2}{\hbar v}=4\pi Z\alpha\left(\frac{c}{v}\right) \tag{3.62}$$

となる．ただし，$\alpha=\frac{e^2}{\hbar c}$．

つぎに，このGを用いてα粒子を放出する原子核の寿命τを計算してみよう．さて衝突当たりの障壁を透過する確率はe^{-G}だから，単位時間当たりにα粒子が原子核から飛び去る確率(＝平均寿命τの逆数)は，

$$\frac{v}{2R}e^{-G}=\frac{1}{\tau}$$
$$\therefore\quad \tau=\frac{2R}{v}e^{G} \tag{3.63}$$

となる．　▮

［問題7］　2つの原子核を衝突させて核融合反応を起こさせるのに，電荷の小さい重水素どうし，または，重水素と3重水素の反応がよく用いられる．なぜか．

［解］　電荷Z_1とZ_2の2つの原子核の反応の確率は，

$$T=e^{-G}=\exp\left(-\frac{2\pi Z_1Z_2e^2}{\hbar v}\right)$$

だけ弱められる．したがって電荷の大きい原子核の場合，より高いエネルギー，つまり，より高い温度が必要になる．　▮

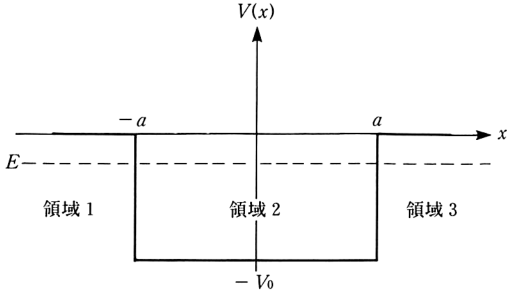


図 3.13

3.5　束縛状態 — 井戸型ポテンシャル

有限の深さの井戸型ポテンシャル

つぎに1次元運動の簡単な例として，井戸型ポテンシャル(図3.13)のなかでの束縛状態$(0>E>-V_0)$を考えてみよう．例によってSchrödinger方程式(3.5)を解くと，$x\to\pm\infty$で$\varphi_1, \varphi_3\to 0$から，

領域1で，

$$\varphi_1 = Ae^{\rho x} \tag{3.64}$$

領域2で，

$$\varphi_2 = B\sin kx + C\cos kx \tag{3.65}$$

領域3で，

$$\varphi_3 = De^{-\rho x} \tag{3.66}$$

となる．ただし，

$$\rho = \sqrt{\frac{-2mE}{\hbar^2}}, \qquad k = \sqrt{\frac{2m(E+V_0)}{\hbar^2}} \tag{3.67}$$

境界$x=-a, x=a$で解をなめらかにつなぐ条件は，

$$\varphi_1(-a) = \varphi_2(-a) \quad より \quad Ae^{-\rho a} = -B\sin ka + C\cos ka \tag{3.68}$$

$$\varphi_1'(-a) = \varphi_2'(-a) \quad より \quad \rho Ae^{-\rho a} = kB\cos ka + kC\sin ka \tag{3.69}$$

$$\varphi_2(a) = \varphi_3(a) \quad より \quad De^{-\rho a} = B\sin ka + C\cos ka \tag{3.70}$$

$$\varphi_2'(a) = \varphi_3'(a) \quad より \quad -\rho De^{-\rho a} = kB\cos ka - kC\sin ka \tag{3.71}$$

これら4式より，

$$\rho = k\frac{B\cos ka + C\sin ka}{-B\sin ka + C\cos ka} = k\frac{-B\cos ka + C\sin ka}{B\sin ka + C\cos ka} \tag{3.72}$$

したがって，$BC=0$．つまり，解はxに関して偶($B=0$)，または，xに関して奇($C=0$)となる．したがって，エネルギーを決める条件は(3.72)よりつぎのようになる．

(i) $B=0, C\neq 0$のとき(xに関して偶関数)，

$$\rho = k\tan ka \tag{3.73}$$

(ii) $C=0, B\neq 0$のとき(xに関して奇関数)，

$$\rho = -k\cot ka \tag{3.74}$$

(i)の場合は，$ka=\xi$, $\rho a=\eta$とすると(3.73)より，

$$\eta = \xi\tan\xi \tag{3.75}$$

となり，一方，(3.67)より，$\rho^2+k^2=\dfrac{2mV_0}{\hbar^2}$であるから，

$$\xi^2+\eta^2=\frac{2mV_0a^2}{\hbar^2} \tag{3.76}$$

したがって，ξ,ηの図(図3.14)で(3.75)と(3.76)の曲線との交点にあたるξ,ηの値が実際にとりうる値である．

V_0a^2の値が増大すると，図3.14より明らかなように，束縛状態の数は増えていく．また，V_0a^2の値がどんなに小さくても，解が少なくとも1つは存在することも明らかである．これは1次元の引力ポテンシャルの場合の特質で，3次元の場合には，引力ポテンシャルであっても必ずしも束縛状態があるとは限らない(第5章を参照)．

(ii)の場合は，$ka=\xi$, $\rho a=\eta$とすると，
(3.74)より，

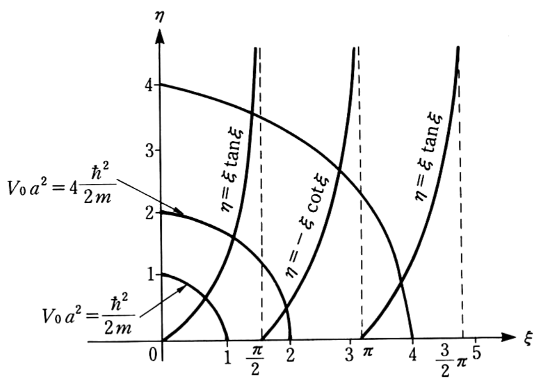


図 3.14

$$\eta = -\xi \cot \xi \tag{3.77}$$

となり，(i)の場合とは異なり，$\dfrac{2mV_0a^2}{\hbar^2} > \dfrac{\pi^2}{4}$ のときのみ解がある．

パリティ

いままでの議論から，ポテンシャルが $V(x) = V(-x)$ をみたすときには，束縛状態の波動関数は x の符号を変えたとき

(i) $B=0, C \neq 0$ のときには x の偶関数，

(ii) $C=0, B \neq 0$ のときには x の奇関数，

であることがわかった．

これは3.1節で示したように，$V(x)$ が $x=0$ に関して対称であるという事実から直接出てくる結果であり，$\varphi(x) = \varphi(-x)$ か $\varphi(x) = -\varphi(-x)$ のどちらかである．このような波動関数のことを，パリティが偶または奇であるという．

解き方の簡単化

解が定まったパリティをもつとき，エネルギー準位の決定が簡単化される．すなわち，その場合，$x \geqq 0$ のときの解さえみつかればよいからである．$x=0$ で解が偶関数ならば $\varphi'(0)=0$，奇関数ならば $\varphi(0)=0$ とおけばよい．

例題　図3.13の井戸型ポテンシャルにおける束縛状態で，偶関数の解および奇関数の解を求めよ．

解　まず x について偶関数の解をみつけよう．(3.65) より，$a > x > 0$ において，

$$\varphi_2(x) = C \cos kx \tag{ⓐ}$$

$x \geqq a$ で，

$$\varphi_3(x) = De^{-\rho x} \tag{ⓑ}$$

$x=a$ で φ の対数微分 $\dfrac{\varphi'}{\varphi}$ が連続ということから，

$$\rho = k \tan ka \tag{ⓒ}$$

が得られる．

同様にして奇関数の解より，

$$\rho = -k \cot ka \tag{ⓓ}$$

を得る．このように解き方が簡単化されることは，明らかである．　▮

[問題8]　幅が $2a$，深さが $-V_0$ の井戸型ポテンシャルがある．いま $2aV_0\,(=\alpha)$ を一定に保ちながら $2a \to 0$，$V_0 \to \infty$ の極限を考える．

(1) このポテンシャルによる束縛状態は，ただ1つ存在することを示し，そのエネルギーを求めよ．

(2) 上のポテンシャルは $V(x)=-2aV_0\delta(x)=-\alpha\delta(x)$ と表される．この場合，直接に束縛状態の問題を解き，(1)の結果と比べよ．

［解］ (1) $2aV_0=\alpha$ とおくと，

$$\xi^2+\eta^2=\frac{2mV_0a^2}{\hbar^2}=\frac{m\alpha a}{\hbar^2}\to 0 \qquad \text{ⓐ}$$

$$\eta=\xi\tan\xi \qquad \text{ⓑ}$$

$2V_0a^2=\alpha a$ がいくら小さくても束縛状態は存在し，ⓐとⓑの交点は 1 つである（図 3.14 をみよ）．$\xi=ka\to 0$ のとき，$\eta=\xi\tan\xi$ は $\eta=\xi^2$ となり，ⓐに代入すると，

$$\eta+\eta^2=\frac{m\alpha a}{\hbar^2} \qquad \text{ⓒ}$$

η は小さいから，

$$\rho a=\eta=\frac{m\alpha a}{\hbar^2}$$

$$\therefore\quad \sqrt{-\frac{2mE}{\hbar^2}}=\rho=\frac{m\alpha}{\hbar^2}$$

$$\therefore\quad E=-\frac{m\alpha^2}{2\hbar^2} \qquad \text{ⓓ}$$

(2) $V(x)=-\alpha\delta(x)$

51ページの［問題 1］を参照すると，

$$\left(\frac{d\varphi(x)}{dx}\right)_{\varepsilon}-\left(\frac{d\varphi(x)}{dx}\right)_{-\varepsilon}=-\frac{2m\alpha}{\hbar^2}\varphi(0) \qquad \text{ⓔ}$$

$x>0$ では $Ae^{-\rho x}$, $x<0$ では $Ae^{\rho x}$ がそれぞれ解になっているからⓔに代入すると，$-2\rho=-\dfrac{2m\alpha}{\hbar^2}$,

$$\therefore\quad E=-\frac{m\alpha^2}{2\hbar^2} \qquad \text{ⓕ}$$

となり，(1)で得た結果に一致する． ▮

3.6 周期的ポテンシャル — Kronig-Penney 模型

一般に金属は結晶構造をもっていて，イオンが周期的に並んでいる．この周期性は，金属中の自由電子の運動に大きな役割をはたし，電気伝導などの固体の性質を理解するうえで，とても重要になる．すなわち，$V(x)=V(x+d)$ のような 1 次元の周期的ポテンシャルを考えよう．

このポテンシャル中での電子のハミルトニアンは，

$$\hat{H}=\frac{\hat{p}^2}{2m}+V(x)$$
$$V(x)=V(x+d) \tag{3.78}$$

で与えられる．このハミルトニアンの固有関数をみつけるために平行移動の演算子，

$$\hat{U}=\exp\left(i\frac{\hat{p}}{\hbar}d\right) \tag{3.79}$$

を考えよう．

例題 1　(3.79)の演算子は，$\hat{U}\varphi(x)=\varphi(x+d)$ の性質をもつことを示せ．

解　$\hat{p}=\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}$ より，

$$\exp\left(i\frac{\hat{p}}{\hbar}d\right)=\exp\left(d\frac{\partial}{\partial x}\right)=1+d\frac{\partial}{\partial x}+\frac{1}{2!}d^2\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\cdots$$

$$\begin{aligned}\hat{U}\varphi(x)&=\exp\left(i\frac{\hat{p}}{\hbar}d\right)\varphi(x)=\exp\left(d\frac{\partial}{\partial x}\right)\varphi(x)\\&=\varphi(x)+d\frac{\partial\varphi(x)}{\partial x}+\frac{1}{2!}d^2\frac{\partial^2\varphi(x)}{\partial x^2}+\cdots\\&=\varphi(x+d)\end{aligned}$$ ▮

ここで演算子 $\hat{U}$ と $\hat{H}$ は交換する．すなわち $[\hat{U},\hat{H}]=0$ をみたすから，$\hat{H}$ の固有関数を考えるときに，それは $\hat{U}$ の固有関数にもなっているとしてよい．

例題 2　上の性質 $[\hat{U},\hat{H}]=0$ を証明せよ．

解　(i) $\hat{U}\frac{\hat{p}^2}{2m}\hat{U}^{-1}=\frac{\hat{p}^2}{2m}$　ⓐ

は自明である．

(ii) $\hat{U}V(x)\hat{U}^{-1}=V(x+d)=V(x)$

が成り立つことをつぎに示しておこう．恒等式

$$e^ABe^{-A}=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{n!}\Big[A,[A,\cdots[A,B]]\Big] \tag{ⓑ}$$

において，$B=V(x)$，$A=i\frac{\hat{p}}{\hbar}d$ とおくと，

$$\left[\frac{i}{\hbar}d\hat{p},\ V(x)\right]=\left[d\frac{\partial}{\partial x},\ V(x)\right]=dV'(x)$$
$$\left[\frac{i}{\hbar}d\hat{p},\ dV'(x)\right]=\left[d\frac{\partial}{\partial x},\ dV'(x)\right]=d^2V''(x)$$
$$\left[\frac{i}{\hbar}d\hat{p},\ d^2V''(x)\right]=\left[d\frac{\partial}{\partial x},\ d^2V''(x)\right]=d^3V'''(x)$$
$$\vdots\qquad\qquad\vdots\qquad\qquad\vdots$$

$$\therefore\quad \hat{U}V(x)\hat{U}^{-1}=e^{i\frac{p}{\hbar}d}V(x)e^{-i\frac{p}{\hbar}d}$$

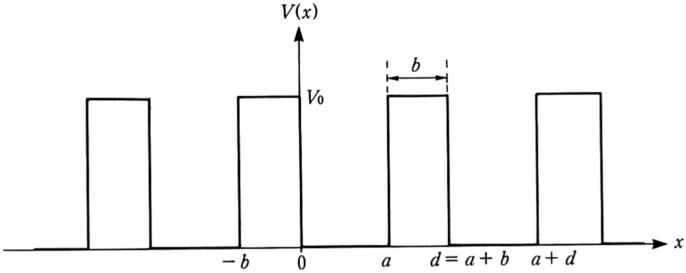


図 3.15

$$= V(x) + dV'(x) + \frac{d^2}{2!}V''(x) + \frac{d^3}{3!}V'''(x) + \cdots$$

$$= V(x+d) = V(x) \qquad ⓒ$$

ⓐ, ⓒより $\hat{U}\hat{H}\hat{U}^{-1} = \hat{H}$, すなわち,

$$[\hat{U},\ \hat{H}] = 0 \qquad ⓓ$$

を得る. ▮

また, (3.79)において $\hat{p}$ はエルミート演算子であるから, $\hat{U}$ はユニタリーとなる[1]. したがって, 固有値の絶対値は 1 となり, 実数の θ を使って,

$$\hat{U}\varphi(x) = e^{i\theta}\varphi(x) \tag{3.80}$$

と書ける. したがって, 例題 1 を使うと,

$$\varphi(x+d) = e^{i\theta}\varphi(x) \tag{3.81}$$

という重要な関係式を得る. これを Bloch の定理とよぶ.

これで準備が整ったので, 図 3.15 で与えられる周期的ポテンシャル中での粒子の運動を考えてみよう.

井戸のなかの障壁の領域, $0 > x > -b$ では,

$$\varphi(x) = Ae^{ik_1x} + Be^{-ik_1x} \tag{3.82}$$

となる. 井戸のなかの領域, $a > x > 0$ では,

$$\varphi(x) = Ce^{ik_2x} + De^{-ik_2x} \tag{3.83}$$

で与えられる. ここに,

$$k_1 = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(E - V_0)} \tag{3.84}$$

$$k_2 = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} \tag{3.85}$$

1)　第 4 章の例題 1 (92ページ) および [問題 1] (94ページ) をみよ.

である．そうするとつぎの周期 $(a+d>x>a)$ において，

$$d>x>a \quad \text{では，} \quad \varphi(x)=e^{i\theta}\left\{Ae^{ik_1(x-d)}+Be^{-ik_1(x-d)}\right\} \tag{3.86}$$

$$a+d>x>d \quad \text{では，} \quad \varphi(x)=e^{i\theta}\{Ce^{ik_2(x-d)}+De^{-ik_2(x-d)}\} \tag{3.87}$$

となる．波動関数および導関数が $x=0$ と $x=a$ で連続という要請から，

$$\begin{aligned} A+B&=C+D \\ k_1(A-B)&=k_2(C-D) \end{aligned} \tag{3.88}$$

$$e^{i\theta}(Ae^{-ik_1b}+Be^{ik_1b})=Ce^{ik_2a}+De^{-ik_2a}$$

$$e^{i\theta}(k_1Ae^{-ik_1b}-k_1Be^{ik_1b})=k_2(Ce^{ik_2a}-De^{-ik_2a})$$

を得る．したがって，A, B, C, D が意味のある解をもつためには，行列式 $\mathscr{D}=0$，すなわち，

$$\mathscr{D}=\begin{vmatrix} 1 & 1 & -1 & -1 \\ k_1 & -k_1 & -k_2 & k_2 \\ e^{i\theta}e^{-ik_1b} & e^{i\theta}e^{ik_1b} & -e^{ik_2a} & -e^{-ik_2a} \\ e^{i\theta}k_1e^{-ik_1b} & -e^{i\theta}k_1e^{ik_1b} & -k_2e^{ik_2a} & k_2e^{-ik_2a} \end{vmatrix}=0 \tag{3.89}$$

のときにのみ得られる．これはつぎの条件

$$\cos\theta=\begin{cases} \cos ak_2\cdot\cosh b\rho-\dfrac{k_2^2-\rho^2}{2k_2\rho}\sin ak_2\cdot\sinh b\rho \\ \qquad\qquad (V_0>E>0 \text{ のとき}) \\ \cos ak_2\cdot\cos bk_1-\dfrac{k_2^2+k_1^2}{2k_2k_1}\sin ak_2\cdot\sin bk_1 \\ \qquad\qquad (E>V_0 \text{ のとき}) \end{cases} \tag{3.90}$$

を与える．ただし，

$$\rho=\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(V_0-E)} \tag{3.91}$$

である．逆に，エネルギー E が与えられると，(3.84)，(3.85)，(3.91) から k_1，k_2，ρ が定まり，(3.90) から $\cos\theta$ が求まる．ところで $1\geqq\cos\theta\geqq-1$ でなければならないから，E の許される値に制限がつくことになる．ここで 2 つの場合を調べてみる．

(i) $V_0>E>0$

許されるエネルギー準位は，

$$1\geqq\cos ak_2\cdot\cosh b\rho-\frac{k_2^2-\rho^2}{2k_2\rho}\sin ak_2\cdot\sinh b\rho\geqq-1 \tag{3.92}$$

より決まり，固有エネルギー・スペクトルのバンド構造を与える．許されたエネルギー・バンドの位置についての一般的な規則性を議論するために，つぎの極限の場

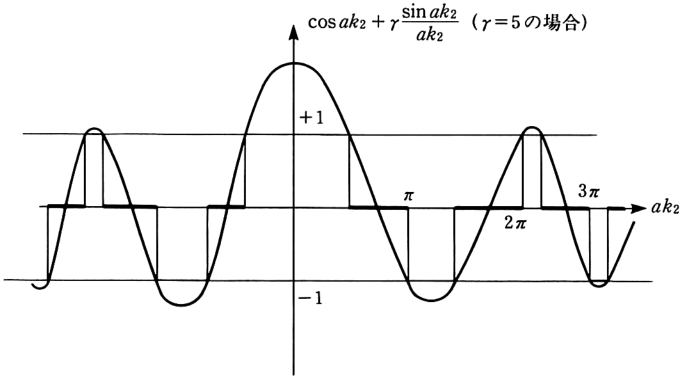


図 3.16

合，すなわち，$b\rho^2$ を一定に保ちながら $b\to0$，$V_0\to\infty$ の極限をとる場合を考えてみよう．

ここで，$\gamma=\lim_{\substack{b\to0\\ \rho\to\infty}} ab\rho^2/2$ とおくと，(3.92)は近似的に，

$$1\geqq\cos ak_2+\gamma\frac{\sin ak_2}{ak_2}\geqq-1 \tag{3.93}$$

となる．

図 3.16 は(3.93)の $\cos ak_2+\gamma\dfrac{\sin ak_2}{ak_2}$ を ak_2 の関数として表したものである．〝許されたエネルギー・バンド〟は太い線で示されている．このなかでは，粒子のエネルギーは連続的に変わることができる．それらの間の領域は〝禁止されたエネルギー・バンド〟とよばれる．図からわかるように，この禁止されたエネルギー・バンドは，バンドの n がふえるに従って狭くなっている．

(ii) $E>V_0$

この場合のエネルギー・バンドは，つぎの一般的な関係式から定まる．

$$1>\cos ak_2\cdot\cos bk_1-\frac{k_2^2+k_1^2}{2k_2k_1}\sin ak_2\cdot\sin bk_1>-1 \tag{3.94}$$

エネルギー・スペクトルは，この場合にもまたバンド構造をもつ．

3.7 1次元調和振動子

もう1つの例として，x 軸上で原点からの距離に比例する引力を受けて単振動をしている粒子について考えてみよう．このような粒子のポテンシャルエネルギーは，

古典力学における角振動数 ω を使って，$\frac{1}{2}m\omega^2x^2$ と表される．したがって，1次元調和振動子のハミルトニアンは，

$$H=\frac{p^2}{2m}+\frac{m\omega^2x^2}{2} \tag{3.95}$$

で与えられる[1]．ゆえに，この場合の Schrödinger 方程式は，

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\varphi(x)}{dx^2}+\frac{m\omega^2x^2}{2}\varphi(x)=E\varphi(x) \tag{3.96}$$

となる．ここで，座標 x の代わりに次元のない変数 ξ および ε を，

$$\xi=\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x \tag{3.97}$$

と，

$$\varepsilon=\frac{2E}{\hbar\omega} \tag{3.98}$$

とによって導入すると，(3.96) は，

$$\frac{d^2\varphi}{d\xi^2}+(\varepsilon-\xi^2)\varphi=0 \tag{3.99}$$

という形になる．

大きな ξ に対しては，ε を ξ^2 に比較して無視することができて，$\varphi(\xi)$ は漸近的に $\exp\left(\pm\frac{1}{2}\xi^2\right)$ の解をもつ．波動関数は $\xi\to\pm\infty$ で有限でなければならないので，指数のなかでは負の符号を選ばなければならない．そこで，

$$\varphi(\xi)=H(\xi)\exp\left(-\frac{1}{2}\xi^2\right) \tag{3.100}$$

なる $H(\xi)$ を導入して，(3.99) に代入すると，

$$\frac{d^2H(\xi)}{d\xi^2}-2\xi\frac{dH(\xi)}{d\xi}+(\varepsilon-1)H(\xi)=0 \tag{3.101}$$

を得る．いま，$H(\xi)$ を，

$$H(\xi)=\sum_{n=0}^{\infty}a_n\xi^n \tag{3.102}$$

の形のべき級数に展開して (3.101) に代入し，両辺の ξ^n の係数を等しいとおくと，

$$(n+1)(n+2)a_{n+2}=(2n-\varepsilon+1)a_n \tag{3.103}$$

1)　この調和振動子の問題は，単に厳密に解ける数少ない例であるだけでなく，原理的により重要な意味をもっている．なぜなら，電磁場をはじめとして場で記述される体系は，無限個の調和振動子からなる体系とみなすことができるからである．

が得られる．$a_{n+2}\simeq\dfrac{2}{n}a_n$ を(3.102)に代入すると，その無限級数は $\xi\to\pm\infty$ で $\exp(\xi^2)$ に発散し，それに $\exp\left(-\dfrac{1}{2}\xi^2\right)$ をかけた $\varphi(\xi)$ をつくってみても収束しないことが証明される．$\xi\to\pm\infty$ で $\varphi(\xi)\to 0$ になるためには，(3.102)の級数は有限のところで切れなければならない．

(3.103)の右辺を 0 とおくと，

$$\varepsilon=2n+1 \quad (n=0,1,2,\cdots) \tag{3.104}$$

となり，$a_{n+2}, a_{n+4}, a_{n+6}, \cdots$ はすべて 0 となる．そのとき，(3.101)は，

$$\frac{d^2H_n(\xi)}{d\xi^2}-2\xi\frac{dH_n(\xi)}{d\xi}+2nH_n(\xi)=0 \tag{3.105}$$

となり，$H_n(\xi)$ は n 次の Hermite 多項式とよばれる(付録A参照)．

3.8　階段型ポテンシャルでの波束のふるまい

古典論では，図 3.3 の階段型ポテンシャルに左の方向から飛んできた粒子は，$x=0$ で弾性的に瞬時にはね返される．量子力学ではどうなるのだろうか(3.2 節参照)．これを調べるため，いま $E<V_0$ とし，波束の中心が古典論の粒子と同じ運動をするような入射波束を考え，時刻 $t=0$ に $x=0$ に到着するとしよう．そのためには，波束を右の方向に進む平面波の重ね合わせとして，

$$\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_0^\infty g(k)e^{i(kx-\omega t)}dk$$

と表し(図 3.17)，$g(k)$ として $k=k_0$ の近辺で絶対値がピークをもち，しかも位相はあまり変化しないものをもってくる．また，$E<V_0$ に対応して $g(k)$ は $k>K_0=\sqrt{\dfrac{2mV_0}{\hbar^2}}$ で 0 であるとしよう．いま，ポテンシャル障壁の左側，つまり $x<0$ の領域を考える．3.2 節で議論したように，入射波の A と反射波の B とは(3.28)で結ば

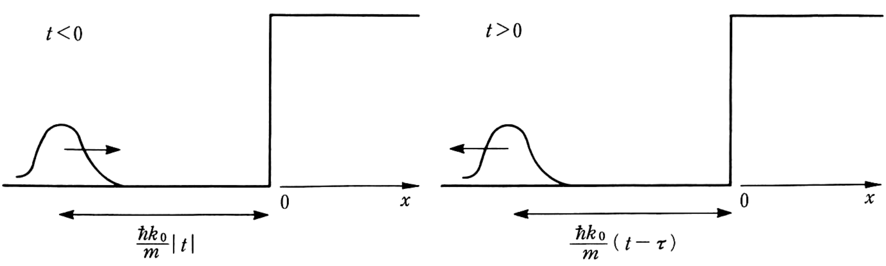


図 3.17

れた関係にある．したがって，

$$\frac{B(k)}{A(k)}=e^{-2i\theta(k)} \tag{3.106}$$

とおくことができる．(3.106)，(3.28)を使うと，

$$\tan\theta(k)=\frac{\sqrt{\frac{2m(V_0-E)}{\hbar^2}}}{\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}}=\frac{\sqrt{K_0{}^2-k^2}}{k} \tag{3.107}$$

となる．いま，考えている波束は，$t=0$ のとき $x<0$ の領域で，

$$\psi(x,0)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_0^{K_0}dk\,g(k)[e^{ikx}+e^{-2i\theta(k)}e^{-ikx}] \tag{3.108}$$

と書くことができる．したがって任意の時刻 t での波束は，$\omega(k)=\dfrac{\hbar k^2}{2m}$ を使って，

$$\psi(x,t)=\psi_{\rm inc}(x,t)+\psi_{\rm refl}(x,t) \tag{3.109}$$

$$\psi_{\rm inc}(x,t)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_0^{K_0}dk\,g(k)e^{i[kx-\omega(k)t]} \tag{3.110}$$

$$\psi_{\rm refl}(x,t)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_0^{K_0}dk\,g(k)e^{-i[kx+\omega(k)t+2\theta(k)]} \tag{3.111}$$

を得る．波束の群速度 $v_0=\dfrac{\hbar k_0}{m}$ とし，入射波束の中心の座標 x_i を計算するには，

$\dfrac{\partial}{\partial k}[kx-\omega(k)t]=0$ とおけばよい．ゆえに，

$$x_i=t\left[\frac{d\omega}{dk}\right]_{k=k_0}=\frac{\hbar k_0}{m}t \tag{3.112}$$

が求まる．同様にして，反射波束の座標 x_r は，

$\dfrac{\partial}{\partial k}[kx+\omega(k)t+2\theta(k)]=0$ より，

$$x_r=-\frac{\hbar k_0}{m}t-2\frac{d\theta}{dk}\bigg|_{k=k_0} \tag{3.113}$$

となる．(3.107)より $\dfrac{d\theta}{dk}\bigg|_{k=k_0}$ を計算すると，

$$\frac{d\theta}{dk}\bigg|_{k=k_0}=-\frac{1}{\sqrt{K_0^2-k_0^2}} \tag{3.114}$$

となり，(3.113)に代入すると，

$$x_r=-\frac{\hbar k_0}{m}t+\frac{2}{\sqrt{K_0^2-k_0^2}} \tag{3.115}$$

を得ることができる．

(3.115) より，入射波束の中心は $t=0$ に $x=0$ に到着するが，$x=0$ で反射される際に，反射波束の中心は，

$$\tau=\frac{2m}{\hbar k_0\sqrt{K_0^2-k_0^2}} \tag{3.116}$$

の時間だけ遅れて反射される．物理的には，$x>0$ の領域に粒子が存在する確率が 0 ではないので，反射される前に，ここで τ 程度の時間をすごすために，おくれが生ずると解釈してよい．

第3章　章 末 問 題

[1] 下図のようなポテンシャル障壁をもつ1次元量子系について，つぎの問いに答えよ．

(1) 左から平面波 $(E>0)$ が入射してくる場合の反射率と透過率を求めよ．

(2) 右から平面波 $(E>V_1)$ で入射してくる場合の反射率と透過率を求めよ．

[解] (1) $E>V_2$ のとき，領域 1, 2, 3 での波動関数を，

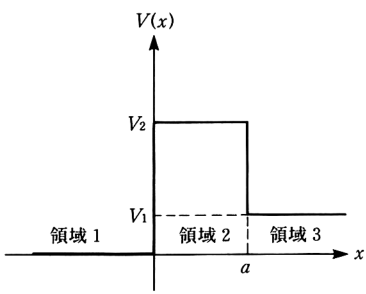
$$\varphi_1(x)=Ae^{ik_1x}+Be^{-ik_1x}$$
$$\varphi_2(x)=Ce^{ik_2x}+De^{-ik_2x}$$
$$\varphi_3(x)=Fe^{ik_3x}$$

とおく．ただし，

$$k_1=\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}},\quad k_2=\sqrt{\frac{2m(E-V_2)}{\hbar^2}},\quad k_3=\sqrt{\frac{2m(E-V_1)}{\hbar^2}}$$

$x=0$ と a でのつなぎの条件より，

$$A+B=C+D \tag{ⓐ}$$
$$k_1(A-B)=k_2(C-D) \tag{ⓑ}$$
$$Ce^{ik_2a}+De^{-ik_2a}=Fe^{ik_3a} \tag{ⓒ}$$



$$k_2(Ce^{ik_2a}-De^{-ik_2a})=k_3Fe^{ik_3a} \qquad ⓓ$$

ⓒ, ⓓから C, D を F で表せば,

$$C=\frac{k_2+k_3}{2k_2}Fe^{-i(k_2-k_3)a} \qquad ⓔ$$

$$D=\frac{k_2-k_3}{2k_2}Fe^{i(k_2+k_3)a} \qquad ⓕ$$

を得る. ⓐ, ⓑを解いて A, B を C, D で表すと,

$$A=\frac{1}{2k_1}\Big((k_1+k_2)C+(k_1-k_2)D\Big)$$

$$B=\frac{1}{2k_1}\Big((k_1-k_2)C+(k_1+k_2)D\Big)$$

となり, これらの式にⓔ, ⓕを代入することにより次式が得られる.

$$\frac{F}{A}=\frac{4k_1k_2e^{i(k_2-k_3)a}}{(k_1+k_2)(k_2+k_3)+(k_1-k_2)(k_2-k_3)e^{2ik_2a}} \qquad ⓖ$$

$$\frac{B}{A}=\frac{(k_1-k_2)(k_2+k_3)+(k_1+k_2)(k_2-k_3)e^{2ik_2a}}{(k_1+k_2)(k_2+k_3)+(k_1-k_2)(k_2-k_3)e^{2ik_2a}} \qquad ⓗ$$

$$\therefore \quad \text{反射率 } R=\frac{|B|^2}{|A|^2}=|\text{ⓗの右辺}|^2$$

$$\text{透過率 } T=\frac{k_3|F|^2}{k_1|A|^2}=\frac{k_3}{k_1}|\text{ⓖの右辺}|^2$$

$V_2>E>V_1$ のとき, $\rho=\sqrt{\dfrac{2m(V_2-E)}{\hbar^2}}$ とおき, 前式で $ik_2\to\rho$ のおきかえをすればよい.

$E<V_1$ のときには, 反射率$=1$, 透過率$=0$ となる.

(2) $E>V_2$ のとき, 一般解は,

$x>a$ で　　$\varphi_3(x)=Ae^{-ik_3x}+Be^{ik_3x}$

$a>x>0$ で　　$\varphi_2(x)=Ce^{-ik_2x}+De^{ik_2x}$

$x<0$ で　　$\varphi_1(x)=Fe^{-ik_1x}$

$x=a$ と 0 で解をつなぐと,

$$Ae^{-ik_3a}+Be^{ik_3a}=Ce^{-ik_2a}+De^{ik_2a} \qquad ⓘ$$

$$k_3(Ae^{-ik_3a}-Be^{ik_3a})=k_2(Ce^{-ik_2a}-De^{ik_2a}) \qquad ⓙ$$

$$C+D=F \qquad ⓚ$$

$$k_2(C-D)=k_1F \qquad ⓛ$$

を得る. (1)の場合と同様にして, ⓚ, ⓛより,

$$C=\frac{k_1+k_2}{2k_2}F,\quad D=-\frac{k_1-k_2}{2k_2}F \qquad ⓜ$$

一方，ⓘ，ⓙより，

$$A=\frac{1}{2k_3}\left\{(k_2+k_3)e^{-i(k_2-k_3)a}C-(k_2-k_3)e^{i(k_2+k_3)a}D\right\}$$

$$B=\frac{1}{2k_3}\left\{-(k_2-k_3)e^{-i(k_2+k_3)a}C+(k_2+k_3)e^{i(k_2-k_3)a}D\right\}$$

これらの式に，ⓜを代入することにより，

$$\frac{F}{A}=\frac{4k_2k_3e^{i(k_2-k_3)a}}{(k_1+k_2)(k_2+k_3)+(k_1-k_2)(k_2-k_3)e^{2ik_2a}} \quad ⓝ$$

$$\frac{B}{A}=-e^{-2ik_3a}\frac{(k_1+k_2)(k_2-k_3)+(k_1-k_2)(k_2+k_3)e^{2ik_2a}}{(k_1+k_2)(k_2+k_3)+(k_1-k_2)(k_2-k_3)e^{2ik_2a}} \quad ⓞ$$

$\therefore$ 反射率 $R=\frac{|B|^2}{|A|^2}=|$ⓞの右辺$|^2$

透過率 $T=\frac{k_1}{k_3}\frac{|F|^2}{|A|^2}=\frac{k_1}{k_3}|$ⓝの右辺$|^2$

$V_2>E>V_1$ のときは，$\rho=\sqrt{\frac{2m(V_2-E)}{\hbar^2}}$ とおき，$ik_2\to\rho$ のおきかえをすればよい．

［2］ ポテンシャルが

$$V(x)=\frac{\hbar^2u}{2m}\left[\delta\left(x+\frac{a}{2}\right)+\delta\left(x-\frac{a}{2}\right)\right],\qquad u\neq 0$$

で与えられる1次元量子系について，つぎの問いに答えよ．

(1) 正のエネルギー固有値Eをもつ状態について，$k\equiv\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$ として各領域での確率の流れの密度を求め，それらの間の関係を議論せよ．ただし，xの正方向からの入射波は存在しないものとし，xの負方向からの入射波の係数が1になるように規格化せよ．

(2) 負のエネルギー固有値をもつ状態について，波動関数が対称性 $\varphi_\pm(x)=\pm\varphi_\pm(-x)$ をもつ束縛状態が存在するための条件を求めよ．

また，波動関数の概形を書け．

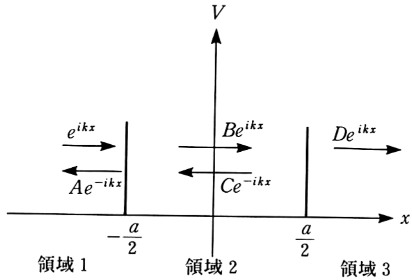
［解］ (1) 領域1, 2, 3 における波動関数を，

$$\varphi_1(x)=e^{ikx}+Ae^{-ikx} \quad ⓐ$$

$$\varphi_2(x)=Be^{ikx}+Ce^{-ikx} \quad ⓑ$$

$$\varphi_3(x)=De^{ikx} \quad ⓒ$$

とおいて，つなぎの条件を考える．$x=-\frac{a}{2}$ で，



$$e^{-\frac{ika}{2}}+Ae^{\frac{ika}{2}}=Be^{-\frac{ika}{2}}+Ce^{\frac{ika}{2}} \qquad ⓓ$$

$$ik\left(Be^{-\frac{ika}{2}}-Ce^{\frac{ika}{2}}\right)-ik\left(e^{-\frac{ika}{2}}-Ae^{\frac{ika}{2}}\right)=u\left(e^{-\frac{ika}{2}}+Ae^{\frac{ika}{2}}\right) \qquad ⓔ$$

同様に，$x=\frac{a}{2}$ で，

$$Be^{\frac{ika}{2}}+Ce^{-\frac{ika}{2}}=De^{\frac{ika}{2}} \qquad ⓕ$$

$$ikDe^{\frac{ika}{2}}-ik\left(Be^{\frac{ika}{2}}-Ce^{-\frac{ika}{2}}\right)=uDe^{\frac{ika}{2}} \qquad ⓖ$$

ⓕ，ⓖから B, C を D で表せば，$\frac{u}{ik}\equiv\sigma$ を用いて，

$$B=\left(1-\frac{\sigma}{2}\right)D \qquad ⓗ$$

$$C=\frac{\sigma}{2}e^{ika}D \qquad ⓘ$$

を得る．ⓓ，ⓔにⓗ，ⓘを代入すると，

$$A-\left[\left(1-\frac{\sigma}{2}\right)e^{-ika}+\frac{\sigma}{2}e^{ika}\right]D=-e^{-ika}$$

$$(1-\sigma)A+\left[\left(1-\frac{\sigma}{2}\right)e^{-ika}-\frac{\sigma}{2}e^{ika}\right]D=(1+\sigma)e^{-ika}$$

となり，この2つの式を解いて，

$$A=\frac{\sigma(2-\sigma)e^{-2ika}+\sigma(2+\sigma)}{(2-\sigma)^2e^{-ika}-\sigma^2e^{ika}} \qquad ⓙ$$

$$D=\frac{4e^{-ika}}{(2-\sigma)^2e^{-ika}-\sigma^2e^{ika}} \qquad ⓚ$$

と求まる．確率の流れの密度 $j=\frac{1}{m}\mathrm{Re}\left(\varphi^*\frac{\hbar}{i}\frac{\partial\varphi}{\partial x}\right)$ に代入すると，

$$j_1=\frac{\hbar k}{m}(1-|A|^2)=\frac{\hbar k}{m}|D|^2$$

$$j_2=\frac{\hbar k}{m}[|B|^2-|C|^2]=\frac{\hbar k}{m}\left(\left|\frac{2-\sigma}{2}\right|^2-\left|\frac{\sigma}{2}\right|^2\right)|D|^2=\frac{\hbar k}{m}|D|^2$$

$$j_3=\frac{\hbar k}{m}|D|^2=\frac{\hbar k}{m}\frac{16}{\left(4-\frac{u^2}{k^2}+\frac{u^2}{k^2}\cos 2ka\right)^2+\left(4\frac{u}{k}+\frac{u^2}{k^2}\sin 2ka\right)^2}$$

などより $j_1=j_2=j_3$ であることが容易に確かめられる．

(2) $\varphi_\pm(x)=\pm\varphi(-x)$ という対称性をもつ解は，つぎのように構成できる．

$$\varphi_{1\pm}(x)=\pm\alpha_\pm e^{\rho x},\quad \varphi_{2\pm}(x)=\frac{\beta_\pm}{2}\left(e^{\rho x}\pm e^{-\rho x}\right),\quad \varphi_{3\pm}(x)=\alpha_\pm e^{-\rho x} \qquad ①$$

ポテンシャルは $V(x)=V(-x)$ をみたすから，定まったパリティの解が存在し，つなぎの条件は $x=a/2$ で考えれば十分である．$\tilde{\rho}=\rho a/2$ とおくと，

$\varphi_2=\varphi_3$ より，

$$\alpha_\pm e^{-\tilde{\rho}}=\frac{\beta_\pm}{2}(e^{\tilde{\rho}}\pm e^{-\tilde{\rho}}) \qquad ⓜ$$

$\varphi_3'-\varphi_2'=u\varphi_3$ より，

$$\rho\left[-\alpha_\pm e^{-\tilde{\rho}}-\frac{\beta_\pm}{2}(e^{\tilde{\rho}}\mp e^{-\tilde{\rho}})\right]=u\alpha_\pm e^{-\tilde{\rho}} \qquad ⓝ$$

ⓜより，

$$\frac{2\alpha_\pm}{\beta_\pm}=e^{\tilde{\rho}}(e^{\tilde{\rho}}\pm e^{-\tilde{\rho}})$$

ⓝより，

$$\frac{2\alpha_\pm}{\beta_\pm}=-\frac{\rho}{u+\rho}e^{\tilde{\rho}}(e^{\tilde{\rho}}\mp e^{-\tilde{\rho}})$$

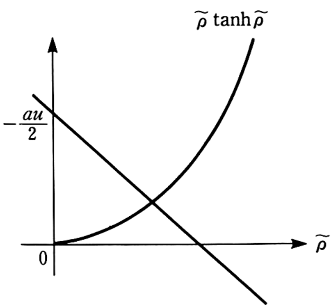


図1

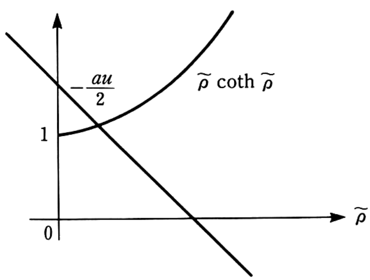


図2

φ_+ の場合

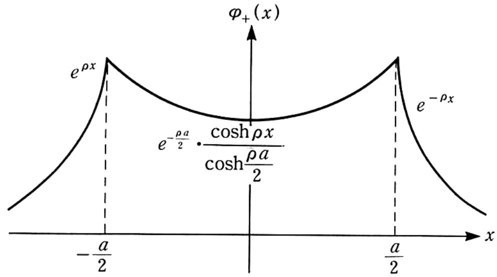


図 3

φ_- の場合

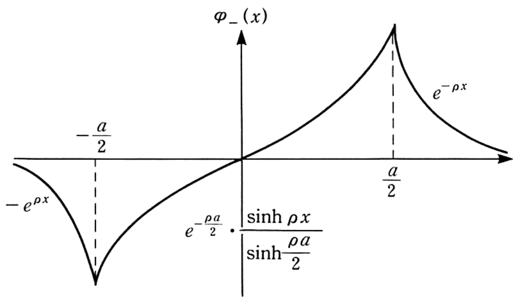


図 4

$$\therefore\ \varphi_+ \text{ に対しては，} -\left(\tilde{\rho}+\frac{au}{2}\right)=\tilde{\rho}\tanh\tilde{\rho} \qquad (\tilde{\rho}>0)$$

i) $u>0$ のとき，(左辺)<0，(右辺)>0．∴ 解はない．

ii) $u<0$ なら，必ず束縛状態が存在する(図 1)．

$$\varphi_- \text{ に対しては，} -\left(\tilde{\rho}+\frac{au}{2}\right)=\tilde{\rho}\coth\tilde{\rho}$$

i) $u>0$ のとき，解なし．

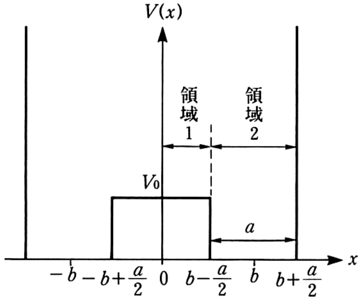
ii) $u<0$ のとき，$-au/2>1$ なら解は存在する(図 2)．

波動関数の概形は図 3，4 のようになる．

［3］ 図のようなポテンシャル $V(x)$ のなかに束縛された電子を考えよう．$E<V_0$ のとき，つぎの問いに答えよ．

(1) 偶関数の解に対応する束縛エネルギーを求める式を導け．

(2) 奇関数の解に対応する束縛エネルギーを求める式を導け．



(3) (2)の場合，最低のエネルギー準位を計算せよ．ただし，$a=2\times10^{-8}$ cm, $b=1.5\times10^{-8}$ cm, $V_0=20$ eV とせよ．

(4) $E\ll V_0$ で，かつ障壁の貫通度が小さいと仮定して，基底状態と第 1 励起状態のエネルギー差を求めよ．

［解］ ポテンシャルが $x=0$ に対して対称だから，

$\varphi_\pm(x)=\pm\varphi_\pm(-x)$ のように偶または奇の解がある．いま，領域 1 ($b-a/2\geqq x\geqq0$)，領域 2 ($b+a/2\geqq x\geqq b-a/2$) における波動関数を，それぞれ $\varphi_{1\pm}(x)$, $\varphi_{2\pm}(x)$ としよう．

領域 2 では, $k_\pm=\sqrt{\dfrac{2mE_\pm}{\hbar^2}}$ であり, $x=b+a/2$ でポテンシャルは ∞ であるから，波動関数は 0 となり，

$$\varphi_{2\pm}(x)=A_\pm\sin\left[k_\pm\left(b+\frac{a}{2}-x\right)\right] \quad ⓐ$$

領域 1 では，$\rho_\pm=\sqrt{\dfrac{2m(V_0-E_\pm)}{\hbar^2}}$ を使って

$$\varphi_{1+}(x)=B_+\cosh\rho_+x \quad ⓑ$$

$$\varphi_{1-}(x)=B_-\sinh\rho_-x \quad ⓒ$$

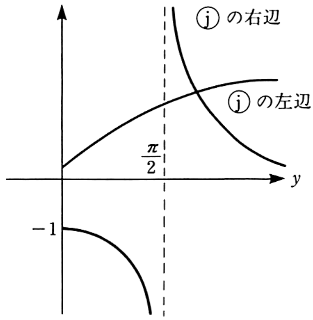
となる．

(1) まず，偶関数の解を求めてみよう．$x=b-a/2$ でつなぎの条件を考えると，$\varphi_{1+}(x)=\varphi_{2+}(x)$, $\varphi_{1+}'(x)=\varphi_{2+}'(x)$ より，

$$A_+\sin k_+a=B_+\cosh\rho_+\left(b-\frac{a}{2}\right) \quad ⓓ$$

$$-k_+A_+\cos(k_+a)=\rho_+B_+\sinh\rho_+\left(b-\frac{a}{2}\right) \quad ⓔ$$

ⓓ, ⓔより，



$$\tan(k_+a) = -\frac{k_+}{\rho_+}\coth\rho_+\left(b-\frac{a}{2}\right) \qquad ⓕ$$

となり，これが束縛エネルギーを求める条件である．

(2) 奇関数の解，同様にして $x=b-a/2$ でのつなぎの条件は，

$$A_-\sin k_-a = B_-\sinh\rho_-(b-a/2) \qquad ⓖ$$

$$-k_-A_-\cos k_-a = \rho_-B_-\cosh\rho_-(b-a/2) \qquad ⓗ$$

であるから，束縛エネルギーを求める条件は，

$$\tan(k_-a) = -\frac{k_-}{\rho_-}\tanh\rho_-(b-a/2) \qquad ⓘ$$

となる．

(3) $k_-a=y$ とおくと，

$$\frac{1}{\sqrt{\frac{2mV_0a^2}{\hbar^2}-y^2}}\tanh\left(\sqrt{\frac{2mV_0a^2}{\hbar^2}-y^2}\,\frac{b-\frac{a}{2}}{a}\right) = -\frac{\tan y}{y} \qquad ⓙ$$

$\therefore\ y>\frac{\pi}{2}$ に解がある（上図）．

$$\frac{b-\frac{a}{2}}{a}=\frac{1}{4},\quad \frac{2mV_0a^2}{\hbar^2}=21.0$$

$$\therefore\ y=2.66$$

$$\therefore\ E=6.73\ \text{eV}$$

ここで，電子の質量 $m=0.51$ MeV，$\hbar c=197$ MeV·fmを用いた．

(4) 障壁の貫通度が小さいと仮定しているから，$\rho_\pm\left(b-\frac{a}{2}\right)\gg 1$ を用いてよい．偶関数（奇関数）の場合，ⓕ，（ⓘ）に上の近似を用いると，

$$\tan(k_\pm a) = -\frac{k_\pm}{\rho_\pm} \mp 2\frac{k_\pm}{\rho_\pm}\exp\left(-2\rho_\pm\left(b-\frac{a}{2}\right)\right) \qquad ⓚ$$

が得られる．ⓚの右辺第2項は非常に小さいので，この項を無視すると，この近似では，エネルギー準位は二重に縮退していて，$k^{(0)}, \rho^{(0)}, E^{(0)}$ の値が得られる．

右辺第2項をとり入れると，粒子が障壁を通って透過可能であることにより，縮退していた2本のエネルギー準位は上下に分離する．この近似では，

$$k_\pm a = \pi - \frac{k^{(1)}}{\rho^{(1)}} \mp 2\frac{k^{(1)}}{\rho^{(1)}}\exp\left(-2\rho^{(1)}\left(b-\frac{a}{2}\right)\right) \qquad ⓛ$$

を得る．偶の解の基底状態のエネルギーを E_+ と書くと，第1励起状態のエネルギーは奇の解の最低エネルギーとなる．これを E_- とおく．2つの状態のエネルギー差は，

$$E_- - E_+ = \frac{\hbar^2}{2m}(k_- + k_+)(k_- - k_+) \qquad ⓜ$$

となる．ⓛより，

$$(k_- + k_+) \simeq \frac{2}{a}\left(\pi - \frac{k^{(0)}}{\rho^{(0)}}\right),$$

$$(k_- - k_+)a \simeq 4\frac{k^{(0)}}{\rho^{(0)}}\exp\left(-2\rho^{(0)}\left(b-\frac{a}{2}\right)\right)$$

が得られ，ⓜに代入すると，

$$E_- - E_+ \simeq \frac{4\hbar^2}{ma^2}\left(\pi - \frac{k^{(0)}}{\rho^{(0)}}\right)\frac{k^{(0)}}{\rho^{(0)}}\exp\left(-2\rho^{(0)}\left(b-\frac{a}{2}\right)\right) \qquad ⓝ$$

が求まる．

［4］ 図5のような1次元の井戸型ポテンシャル内における質量 m の粒子の運動を考える．

(1) この井戸の場合の基底状態のエネルギーが，$V_0 \to \infty$ の場合のエネルギーと20％だけ違っているときの V_0 の値を求めよ．

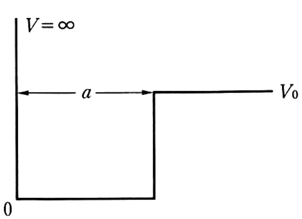


図5

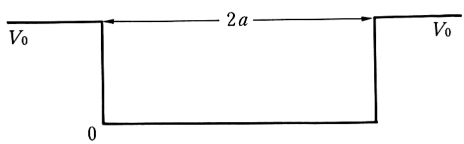


図6

(2) 図6のような井戸型ポテンシャルにおいて，V_0 を(1)で求めた値に等しくとる．(1)の結果を用い，詳しい計算をせずにこの井戸内の第1励起状態のエネルギーを求めよ．

(3) (2)と同じ形のポテンシャルに対して，束縛状態が1個だけになるのはどんな場合か．

［解］ (1)
$$V_0=\frac{\hbar^2}{2ma^2}y_0^2 \quad \text{ⓐ}$$

とし，束縛状態のエネルギーを

$$E=\frac{\hbar^2}{2ma^2}y^2 \quad \text{ⓑ}$$

とおくと，波動関数は，

$$0\leqq x\leqq a \text{ で} \quad \varphi=A\sin\left(\frac{y}{a}x\right)$$

$$a\leqq x \quad \text{で} \quad \varphi=B\exp\left(-\sqrt{{y_0}^2-y^2}\frac{x}{a}\right)$$

となる．$x=a$ で φ の対数微分がつながることより，

$$y\cot y=-\sqrt{y_0^2-y^2} \quad \text{ⓒ}$$

を得る．基底状態は図7上のAで与えられる．$V_0\to\infty$ のときは，$y\to\pi$ となるから，このときの基底状態のエネルギーは，$E_0=\dfrac{\hbar^2}{2ma^2}\pi^2$ である．ⓑの y 依存性から明らかなように，基底状態のエネルギーが $0.8E_0$ になるのは，$y=\sqrt{0.8}\pi$ のときである．ところが，ⓐとⓒより，

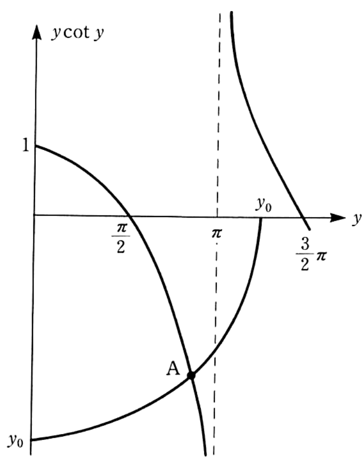


図7

$$V_0=\frac{\hbar^2}{2ma^2}\frac{y^2}{\sin^2 y} \qquad ⓓ$$

が得られるから，求める V_0 の値は，

$$V_0=\frac{\hbar^2}{2ma^2}\left(\frac{\sqrt{0.8}\pi}{\sin(\sqrt{0.8}\pi)}\right)^2=\frac{\hbar^2}{2ma^2}\pi^2\cdot\frac{0.8}{\sin^2(\sqrt{0.8}\pi)}$$
$$=7.54\ E_0$$

で与えられる．

(2) ポテンシャルは $x=a$ に関する折り返しに対して対称であるから，第1励起状態はこの折り返しに関して奇である．これは(1)で考えた基底状態と同じエネルギーをもつから，求めるエネルギーは，

$$0.8E_0=\frac{\hbar^2\pi^2}{2ma^2}\times 0.8$$

である．

(3) 第1励起状態がなくなるのは，ⓒが解をもたなくなる場合であり，$y_0\leqq\frac{\pi}{2}$ で与えられる．ⓐより，それは，

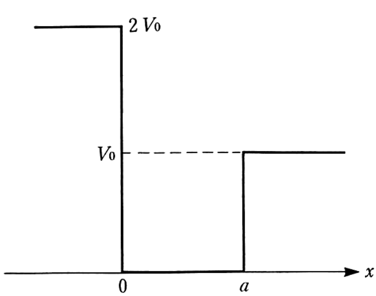
$$V_0\leqq\frac{\hbar^2}{2ma^2}\left(\frac{\pi}{2}\right)^2$$

で与えられる．ここで，$y_0=\frac{\pi}{2}$ の場合は，ⓒは $y=\frac{\pi}{2}$ という解をもっているが，波動関数は，$x\geqq a$ では，$\varphi=$一定 となってしまい，規格化可能でなくなることに注意しよう．

［5］ 下図のような非対称なポテンシャルの井戸がある場合に，質量mの粒子に対する束縛状態がただ1つだけ存在するための V_0，a のみたすべき条件を求めよ．

［解］

$$V_0=\frac{\hbar^2}{2ma^2}{y_0}^2 \qquad ⓐ$$



とし，束縛状態のエネルギーを，

$$E=\frac{\hbar^2}{2ma^2}y^2$$

とおく．

波動関数は，

$$x \leqq 0\ のとき, \qquad \varphi=A\exp\left(\sqrt{2{y_0}^2-y^2}\,\frac{x}{a}\right)$$

$$0 \leqq x \leqq a\ のとき, \qquad \varphi=B\sin\left(\frac{y}{a}x\right)+C\cos\left(\frac{y}{a}x\right)$$

$$a \leqq x\quad のとき, \qquad \varphi=D\exp\left(-\sqrt{{y_0}^2-y^2}\,\frac{x}{a}\right)$$

であり，$x=0$ および $x=a$ で φ の対数微分がつながることより，つぎの2式が得られる．

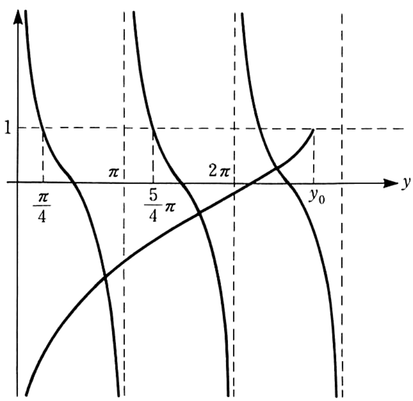
$$\sqrt{2{y_0}^2-y^2}=\frac{B}{C}y$$

$$-\sqrt{{y_0}^2-y^2}=\frac{B\cos y-C\sin y}{B\sin y+C\cos y}y$$

この2式から，B と C を消去すると，

$$\cot y=\frac{y-\dfrac{1}{y}\sqrt{(y_0^2-y^2)(2y_0^2-y^2)}}{\sqrt{2y_0^2-y^2}+\sqrt{y_0^2-y^2}}$$

となる．両辺を図示すると下図のようになり，束縛状態がただ1つ存在するのは，



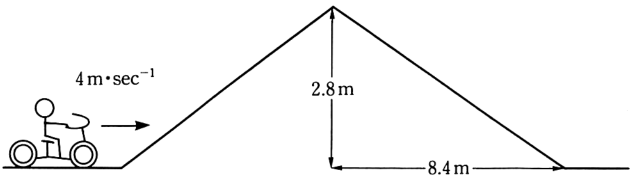
$$\frac{\pi}{4} < y_0 \leqq \frac{5}{4}\pi$$

のときである．ⓐよりこれは，

$$\frac{\pi}{4} < \sqrt{\frac{2ma^2V_0}{\hbar^2}} \leqq \frac{5}{4}\pi$$

と書ける．

［6］ 下図のような築山に向かって三輪車に乗った子供が $4\,\mathrm{m \cdot sec^{-1}}$ の初速で進入した．この子供が，トンネル効果で反対側に突き抜ける確率はどの程度か．重力加速度 g は $10\,\mathrm{m \cdot sec^{-2}}$ とし，子供と三輪車の質量の和 M は $20\,\mathrm{kg}$ とする．



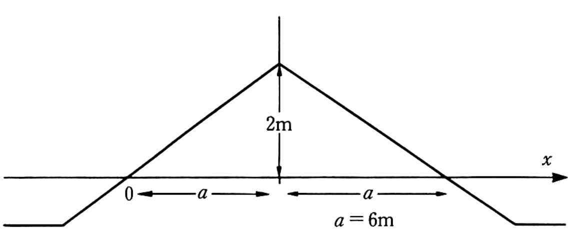
［解］ 古典的な回帰点の高さ h は，$\frac{1}{2}Mv^2 = Mgh$ より $h = 0.8\,\mathrm{m}$ である．

トンネル確率は一般に，

$$\exp\left(-2\int dx\sqrt{\frac{2M(V(x)-E)}{\hbar^2}}\right)$$

で与えられるが，ここで積分は古典的に禁止されている領域，すなわち，$V(x) \geqq E$ の範囲である．この場合に当てはめると，回帰点からの距離を x とすると，山の頂点は $x = a = 6\,\mathrm{m}$ に対応し，$0 \leqq x \leqq a$ の範囲で $V(x) - E = Mg \cdot \frac{x}{3}$ と書けるから，

$$\int dx\sqrt{\frac{2M(V(x)-E)}{\hbar^2}} = 2\int_0^a dx\frac{M}{\hbar}\sqrt{\frac{2g}{3}x} = \frac{4M}{3\hbar}\sqrt{\frac{2g}{3}a^3}$$



$M=20\,\mathrm{kg}$, $g=10\,\mathrm{m\cdot sec^{-2}}$, $a=6\,\mathrm{m}$, $\hbar=1.05\times10^{-34}\,\mathrm{J\cdot sec}$ を代入すると，上の値は，1.0×10^{37} となるから，トンネル確率は $\exp(-2\times10^{37})$ となり，非常に小さいことがわかる．

［7］ mを電子の質量，aは格子定数，γは正の無次元の定数としたとき，

$$V(x)=\frac{\hbar^2\gamma}{ma}\sum_{n=-\infty}^{\infty}\delta(x+na)$$

なる1次元ポテンシャル中を運動する電子に対して，許されるエネルギー・バンドを求めよ．

［解］ エネルギーを $E=\dfrac{\hbar^2}{2ma^2}y^2$ とおくと，波動関数は，$-a<x<0$ で

$\varphi=A\exp\left(i\dfrac{y}{a}x\right)+B\exp\left(-i\dfrac{y}{a}x\right)$ と書ける．ポテンシャルは周期 a をもつから，Bloch の定理により，$0<x<a$ では，

$$\begin{aligned}\varphi&=Ae^{i\theta}e^{i\frac{y}{a}(x-a)}+Be^{i\theta}e^{-i\frac{y}{a}(x-a)}\\&=Ae^{i(\theta-y)}e^{i\frac{y}{a}x}+Be^{i(\theta+y)}e^{-i\frac{y}{a}x}\end{aligned}$$

としてよい．$x=0$ における接続条件，

$$\varphi(-\varepsilon)=\varphi(\varepsilon),$$

$$\varphi'(\varepsilon)-\varphi'(-\varepsilon)=\frac{2\gamma}{a}\varphi(0)$$

より，

$$A+B=Ae^{i(\theta-y)}+Be^{i(\theta+y)} \tag{ⓐ}$$

$$i\frac{y}{a}(Ae^{i(\theta-y)}-Be^{i(\theta+y)}-A+B)=\frac{2\gamma}{a}(A+B) \tag{ⓑ}$$

を得る．ⓐとⓑが A, B について自明でない解をもつ条件は，

$$\begin{vmatrix} e^{i(\theta-y)}-1 & e^{i(\theta+y)}-1 \\ -e^{i(\theta-y)}+1-i\dfrac{2\gamma}{y} & e^{i(\theta+y)}-1-i\dfrac{2\gamma}{y}\end{vmatrix}=0$$

で与えられるが，少し変形すると，

$$\gamma\frac{\sin y}{y}+\cos y=\cos\theta$$

であることがわかる．すなわち，許されるエネルギー・バンドは，

$$-1\leqq\gamma\frac{\sin y}{y}+\cos y\leqq1$$

で与えられるが，これは，(3.93)と一致している．

第 4 章　量子力学の基本的な性質

第 3 章で, Schrödinger 方程式が解ける 1 次元の簡単な系を調べ, 量子力学的効果を示すエッセンスの一端にふれてきた. 先に進む前に, このあたりで量子力学的演算子の物理的意味をはっきりと定義しておこう.

量子力学におけるすべての物理量で重ね合わせの原理が満足されるように**線型**で, しかも期待値が実数になるように**エルミート**な演算子を対応させる(4.1 節). エルミート性の定義とそこから出てくる性質の結果として, いくつかの基本的な性質を導く(4.2 節). 固有関数が 2 乗積分可能という特別な場合に限って議論し(4.3 節), つぎに固有値のスペクトルが連続な部分を含む一般の場合についても考察する(4.4 節). さらに, 量子力学の理論体系をつくるうえで重要になる∞次元のベクトル空間の概念を簡単に説明する(4.5 節). 4.7 節では Dirac によるエレガントな演算子法を解説しておこう. この方法は 4.5 節の波動関数の空間の簡明な具体例にもなっている.

4.1　物理量とエルミート演算子

エルミート演算子

第 2 章(2.5 節)において，物理量 A に対応した演算子を $\hat{A}$ とよび，重ね合わせの原理を満たすためには，$\hat{A}$ が線型演算子でなければならないことを述べた．演算子 $\hat{A}$ が物理量を表現しているならば，その期待値は当然実数でなければならない．時刻 t における状態 $\psi(\boldsymbol{r},t)$ での A の期待値は，

$$\langle A\rangle=\int\psi^*\hat{A}\psi d^3r \tag{4.1}$$

のように与えられたから，その複素共役は，

$$\langle A\rangle^*=\int(\hat{A}\psi)^*\psi d^3r \tag{4.2}$$

と書ける．$\langle A\rangle$ が実数であるための条件は，$\langle A\rangle=\langle A\rangle^*$ であるから，演算子 $\hat{A}$ に対する積分の等式

$$\int\psi^*\hat{A}\psi d^3r=\int(\hat{A}\psi)^*\psi\ d^3r \tag{4.3}$$

が成立しなければならない[1)]．この(4.3)をみたす演算子を**エルミート演算子**という．たとえば，位置座標の演算子 $\hat{\boldsymbol{r}}$，運動量演算子 $\hat{\boldsymbol{p}}$，ハミルトニアン $\hat{H}$ はエルミート演算子である．

例題 1　$\hat{\boldsymbol{p}}$ がエルミートであることを示せ．

解　$\hat{\boldsymbol{p}}=\dfrac{\hbar}{i}\nabla$ だから，

$$\int\psi^*\hat{\boldsymbol{p}}\psi d^3r=\frac{\hbar}{i}\int\psi^*\nabla\psi d^3r$$

右辺の部分積分を行い表面項をおとすと，

$$(\text{右辺})=-\frac{\hbar}{i}\int(\nabla\psi^*)\psi d^3r=\int\left(\frac{\hbar}{i}\nabla\psi\right)^*\psi d^3r=\int(\hat{p}\psi)^*\psi d^3r$$

すなわち，エルミート演算子であるための条件(4.3)をみたしている．　∎

ここでエルミート演算子の重要な性質を 1 つ述べておこう．いま，ψ_1,ψ_2 を 2 乗積分可能な任意の関数とすると，

$$\psi=\psi_1+\lambda\psi_2 \tag{4.4}$$

も 2 乗積分可能な関数である．$\langle A\rangle$ が実数であるという条件(4.3)に(4.4)を代入すると，

1)　(4.3)のような関係式は一般的には成り立たない．したがって，この式は演算子 $\hat{A}$ の可能な形に対して課せられるある制限を表している．

$$\int(\psi_1{}^* + \lambda^* \psi_2{}^*)\hat{A}(\psi_1 + \lambda\psi_2)d^3r = \int(\hat{A}\psi_1 + \lambda\hat{A}\psi_2)^*(\psi_1 + \lambda\psi_2)d^3r \tag{4.5}$$

となる．$\langle A \rangle$ が実数である条件

$$\int\psi_i{}^*\hat{A}\psi_i d^3r = \int(\hat{A}\psi_i)^*\psi_i d^3r \qquad (i=1,2) \tag{4.6}$$

を使うと，

$$\lambda^*\left[\int\psi_2{}^*\hat{A}\psi_1 d^3r - \int(\hat{A}\psi_2)^*\psi_1 d^3r\right] + \lambda\left[\int\psi_1{}^*\hat{A}\psi_2 d^3r - \int(\hat{A}\psi_1)^*\psi_2 d^3r\right] = 0 \tag{4.7}$$

となるが，これは λ がどんな複素数の値をとっても成り立つから，λ の係数と λ^* の係数はそれぞれ0でなければならない．つまり，

$$\int\psi_2{}^*\hat{A}\psi_1 d^3r = \int(\hat{A}\psi_2)^*\psi_1 d^3r \tag{4.8}$$

が成り立つ．したがって，(4.8)はしばしばエルミート演算子を定義する関係式として用いられる．

エルミート共役な演算子

いま任意の演算子 $\hat{A}$ が与えられているとき，任意の ψ_1 と ψ_2 に対して，

$$\int(\hat{A}\psi_2)^*\psi_1 d^3r = \int\psi_2{}^*\hat{A}^\dagger\psi_1 d^3r \tag{4.9}$$

の関係をみたすとき，$\hat{A}^\dagger$ を $\hat{A}$ に対する**エルミート共役な演算子**という．(4.9)で，とくに $\hat{A}^\dagger = \hat{A}$ のとき，つまり，自己共役のとき $\hat{A}$ をエルミート演算子という．

演算子について，いくつかの簡単な性質をあげておこう．

1. 任意の演算子 $\hat{A}$，$\hat{B}$ の積を考える．この積のエルミート共役は，

$$(\hat{A}\hat{B})^\dagger = \hat{B}^\dagger\hat{A}^\dagger \tag{4.10}$$

で与えられる．

例題 2　(4.10)を証明せよ．

解　$$\int\psi_2{}^*(\hat{A}\hat{B})^\dagger\psi_1 d^3r = \int(\hat{A}\hat{B}\psi_2)^*\psi_1 d^3r \tag{ⓐ}$$

(4.9)の定義式を順次適用すると，

$$\int(\hat{A}\hat{B}\psi_2)^*\psi_1 d^3r = \int(\hat{B}\psi_2)^*\hat{A}^\dagger\psi_1 d^3r = \int\psi_2{}^*\hat{B}^\dagger\hat{A}^\dagger\psi_1 d^3r \tag{ⓑ}$$

ⓐ，ⓑを比較すると(4.10)が得られる．　∎

2. (4.10)の結果を一般化すると，

$$(\hat{A}\hat{B}\hat{C}\cdots\hat{Z})^\dagger = \hat{Z}^\dagger\cdots\hat{C}^\dagger\hat{B}^\dagger\hat{A}^\dagger \tag{4.11}$$

となる．

3. 2つのエルミート演算子 $\hat{A}$，$\hat{B}$ が可換であれば，その積 $\hat{A}\hat{B}$ もエルミートであ

る((4.10)を用いて各自確かめよ).

4. 一般に $\hat{A}$ と $\hat{B}$ が，線型でエルミートな演算子であれば，

$$\frac{1}{2}(\hat{A}\hat{B}+\hat{B}\hat{A}),\quad i(\hat{A}\hat{B}-\hat{B}\hat{A}) \tag{4.12}$$

も線型でエルミートである.

[問題 1]　$\hat{A}$ がエルミート演算子であるとき，$U\equiv e^{i\hat{A}}$ のエルミート共役な演算子を求め，U がユニタリーであることを示せ.

[解]　$U\equiv e^{i\hat{A}}=\hat{E}+i\hat{A}+\dfrac{(i\hat{A})^2}{2\,!}+\cdots+\dfrac{(i\hat{A})^n}{n\,!}+\cdots$　　($\hat{E}$ は恒等演算子)

$\hat{A}$ のエルミート共役な演算子 $\hat{A}^\dagger=\hat{A}$，一般に $[(\hat{A})^n]^\dagger=(\hat{A}^\dagger)^n=\hat{A}^n$.

$$\therefore\quad U^\dagger=(e^{i\hat{A}})^\dagger=\hat{E}-i\hat{A}+\frac{(-i\hat{A})^2}{2!}+\cdots+\frac{(-i\hat{A})^n}{n!}+\cdots=e^{-i\hat{A}}=U^{-1}$$

したがって U がユニタリーであることを示せた. ∎

4.2　エルミート演算子の固有関数と固有値

A という物理量を測定する実験を多数回繰り返し行ったとき，A の値の測定結果の統計的分布のゆらぎを考えてみよう．まず，状態 ψ で記述される任意の状態における期待値からの偏差の 2 乗平均を計算する. 実際に $\varDelta A=a-\langle A\rangle$ と，これに対応するエルミート演算子

$$\widehat{\varDelta A}=\hat{A}-\langle A\rangle \tag{4.13}$$

を導入すれば，

$$\langle(\varDelta A)^2\rangle=\int\psi^*(\widehat{\varDelta A})(\widehat{\varDelta A})\psi d^3r \tag{4.14}$$

となる．演算子 $\widehat{\varDelta A}$ のエルミート性を利用して(4.14)を書きかえると，

$$\begin{aligned}\langle(\varDelta A)^2\rangle&=\int[(\widehat{\varDelta A})\psi]^*(\widehat{\varDelta A})\psi d^3r\\&=\int|(\hat{A}-\langle A\rangle)\psi|^2d^3r\geqq 0\end{aligned} \tag{4.15}$$

となる．ゆらぎがないのは，$\langle(\varDelta A)^2\rangle$ が 0 になる場合である．(4.15)を使えば，$\langle(\varDelta A)^2\rangle=0$ であるような状態，すなわち物理量 A がはっきりきまった値をとる状態を決めることができる．積分記号のなかの量は常に正または 0 であるから，積分がゼロになるのは，条件

$$(\hat{A}-\langle A\rangle)\psi=0 \tag{4.16}$$

が成り立つ場合だけである. 方程式(4.16)を満足する状態 ψ では，物理量 A がはっきりきまった値をとること，つまり，$a=\langle A\rangle$ を考慮して(4.16)を書きかえると，

$$\hat{A}\psi = a\psi \tag{4.17}$$

を得る．

この型の方程式の例は，すでに 2.6 節(定常状態)で，時間を含まない Schrödinger 方程式(2.71)として与えられている．波動関数は物理系の状態を表すものでなければならない．そのため，波動関数は 2 乗積分可能であるとする[1]．一般に方程式(4.17)がこの条件をみたす解をもつのは，物理量 A のある特定の値に対してだけであって，その値はとびとびのこともあれば，連続的な値のこともある．このような特定の値を演算子 $\hat{A}$ の固有値とよび，その値に対応する(4.17)の解を固有関数とよぶ，そして，固有値の全体を演算子の**スペクトル**という．

異なる固有値に対応する演算子 $\hat{A}$ の固有関数を区別するために，固有値 a に対応する固有関数を φ_a のように書くことにすると，(4.17)は，

$$\hat{A}\varphi_a = a\varphi_a \tag{4.18}$$

となる．固有値のスペクトルがとびとびであれば，固有値に，$a_1, a_2, \cdots, a_i, \cdots$ のように番号をつけることができる．この場合には，a_i に対応する固有関数 φ_{a_i} を φ_i とすることが多い．そこで固有値方程式を，

$$\hat{A}\varphi_i = a_i\varphi_i \tag{4.19}$$

と書くことにしよう．固有値と固有関数を決める整数 i を**量子数**とよぶ．

こうして，われわれはつぎの結論を得ることができた．

> 状態 φ_a で物理量 A を測定した結果は，確実に a という値になる．演算子 $\hat{A}$ のどの固有関数とも一致しない波動関数 ψ によって状態が記述されているときには，この状態で物理量 A を測定すると，いろいろの値が得られるが，そのいずれも $\hat{A}$ の固有値のどれかに一致している．

このような考え方をすると，量子力学的演算子の物理的意味がはっきりする．

[問題 2] 簡単のため，1 次元の Schrödinger 方程式

$$\hat{H}\varphi_E(x) = E\varphi_E(x) \quad ①$$

を考える．もし，

$$\int \varphi_E{}^*(x)\varphi_E(x)dx < \infty \quad ②$$

ならば，エネルギーはとびとびのスペクトルをもつことを証明せよ．

---

1) 波動関数 ψ が 2 乗積分可能であることを要求するのは，一般には条件がきつすぎる．たとえば，$\dfrac{\hbar}{i}\dfrac{\partial}{\partial x}$ の固有関数 $\exp\left(\dfrac{i}{\hbar}px\right)$ は 2 乗積分可能ではない．この欠点をどのようになおせばよいかは，4.4 節で議論する．

[解]　E の近傍で①が成り立つならば，

$$\hat{H}\varphi_{E+\delta E}(x)=(E+\delta E)\varphi_{E+\delta E}(x) \qquad ⓐ$$

も成り立つ．いま，$\varphi_{E+\delta E}=\varphi_E+\delta\varphi_E$ とおき，ⓐに代入すると，

$$\hat{H}\varphi_E+\hat{H}\delta\varphi_E=E\varphi_E+\delta E\varphi_E+E\delta\varphi_E+\delta E\delta\varphi_E \qquad ⓑ$$

$\delta E\delta\varphi_E$ を他の項に対して省略すると，

$$\hat{H}\delta\varphi_E=\delta E\varphi_E+E\delta\varphi_E \qquad ⓒ$$

左から $\varphi_E{}^*$ をかけて積分すると，

$$\int\varphi_E{}^*\hat{H}\delta\varphi_E dx=\delta E\int\varphi_E{}^*\varphi_E dx+E\int\varphi_E{}^*\delta\varphi_E dx$$

左辺は $E\int\varphi_E{}^*\delta\varphi_E dx$ になるから，$\delta E\int\varphi_E{}^*\varphi_E dx=0$．②を用いて $\delta E=0$．それゆえ，E の近傍にスペクトルは存在しない．　▮

4.3　エルミート演算子の固有関数の性質 I — とびとびのスペクトルの場合

4.2 節[問題 2]のように，演算子 $\hat{A}$ が縮退[1]していないとびとびの固有値のスペクトル a_i をもつものとしよう．この演算子の固有関数は方程式(4.19)を満足する．ここでエルミート性の定義と，それから出てきた性質の結果として，いくつかの基本的性質を導くことができる．

固有値の実数性

(4.19)の両辺に左から $\varphi_i{}^*$ をかけて全空間で積分すると，

$$\int\varphi_i{}^*\hat{A}\varphi_i d^3r=a_i\int\varphi_i{}^*\varphi_i d^3r \qquad (4.20)$$

が得られる．左辺はエルミート性の定義から実数，右辺の積分も実数なので，

固有値 a_i は実数である．

という性質が得られる．

固有関数の直交規格化性

量子数が j のとき，(4.19)は，

$$\hat{A}\varphi_j=a_j\varphi_j \qquad (4.21)$$

となる．(4.19)の複素共役に右から φ_j をかけ，(4.21)に左から $\varphi_i{}^*$ をかける．つぎに得られた式の両辺を全空間にわたって積分し，一方の式から他方の式を引けば，$\hat{A}$ のエルミート性の条件を用いて，

1) 同じ固有値をもつ 1 次独立な固有関数が複数個あるとき，縮退があるという．

$$(a_i - a_j)\int \varphi_i^* \varphi_j d^3 r = 0 \tag{4.22}$$

を得る．よって $a_i \neq a_j$ ならば，

$$\int \varphi_i^* \varphi_j d^3 r = 0 \tag{4.23}$$

が得られる．すなわち，

異なる固有値に属する2つの固有関数は直交する．

2.6節で述べたように，とびとびのエネルギー・スペクトルの状態にある粒子は，必ず空間の有限領域内に存在していなければならない．したがって，固有値が a_i に属する固有関数 φ_i の全空間にわたる積分 $\int |\varphi_i|^2 d^3 r$ は常に有限の値をとる．そこで必ず規格化ができる．すでに規格化の手続きがすんでいるものとして(4.23)をいっしょにすれば，

$$\int \varphi_i^* \varphi_j d^3 r = \delta_{ij} \tag{4.24}$$

を満足していることがわかる．すなわち，

とびとびのスペクトルをもつ演算子の固有関数の全体は，直交規格化関数系をつくっている．

ここまでこの節では，$\hat{A}$ が縮退していないとびとびの固有値 a_i をもつ場合について議論してきた．ところが，1つの固有値 a_i に対応して縮退した固有関数が存在している場合には，1, 2, …にはじまり，縮退度に等しい数でおわる添字をつけ加える必要がある．たとえば，l 重縮退では，1個の固有値 a_i に対して l 個の関数 $\varphi_{i1}, \varphi_{i2}, \cdots, \varphi_{il}$ が存在する．これらの関数のなかで，同一の固有値 a_i に属する $\varphi_{i1}, \varphi_{i2}, \cdots, \varphi_{il}$ は一般には直交していない．しかし，これらの l 個の1次独立な関数は，同じく演算子 $\hat{A}$ の固有関数であり，たがいに直交している別の関数でおきかえることができる．

例として2重縮退の場合で，このことを示そう．いま，

$$\hat{A}\varphi_{i1} = a_i \varphi_{i1}, \qquad \hat{A}\varphi_{i2} = a_i \varphi_{i2}$$

で，

$$\int \varphi_{i1}^* \varphi_{i2} d^3 r = K \neq 0$$

としよう．つぎに，

$$\varphi_{i2}' = \alpha \varphi_{i1} + \beta \varphi_{i2}$$

をつくり，

$$\int \varphi_{i1}^* \varphi_{i2}' d^3 r = 0$$

を要求しよう．φ_{i1}，φ_{i2} は 1 に規格化されていると仮定する．これとは別に，φ_{i2}' の規格化条件をつけると α，β が求まり，

$$\varphi_{i2}'=\frac{K\varphi_{i1}-\varphi_{i2}}{\sqrt{1-|K|^2}} \tag{4.25}$$

と決まる．この新しい関数は，φ_{i1} に直交している．

3 重縮退の場合には，$\varphi_{i1}, \varphi_{i2}', \varphi_{i3}$ の 1 次結合として φ_{i3}' をつくり，φ_{i3}' が φ_{i1} と φ_{i2}' に直交するという条件と φ_{i3}' の規格化条件をつければよい．条件が 3 つあるので，3 つの未知数が決まる．同様にして，$\varphi_{i1}, \varphi_{i2}', \varphi_{i3}', \cdots, \varphi_{il}'$ が直交規格化関係をみたすように選ぶことができる．

縮退がない固有関数の直交規格化を指定する関係は，(4.24) で与えられたが，もし縮退があれば，(4.24) のかわりに，

$$\int \varphi_{il}{}^* \varphi_{jm} d^3r=\delta_{ij}\delta_{lm} \tag{4.26}$$

としなければならない．この添字 l, m は互いに直交する縮退固有関数を区別するものである．しかし，縮退のあるときも，わざわざ l，m をとり出して示さないで，(4.24) をそのまま用い，その指数のなかに l，m を含めるほうが便利なことが多い．

直交規格化固有関数による展開

量子力学で用いられるエルミート演算子の固有値が常に重要なのは，対応する物理量を測定したときに，それが得られる値を決めるからである．もし系の状態を記述する波動関数が $\hat{A}$ の固有関数の 1 つの φ_i に一致するならば，この状態で物理量 A は，はっきりきまった値をとる．

波動関数 ψ が $\hat{A}$ の固有関数 φ_i のどれとも一致しなければ，この状態では物理量 A は，はっきりきまった値をとらず，$\hat{A}$ の測定を繰り返し行えばさまざまな a_i の値が得られる．しかし，その平均値は，

$$\langle A\rangle=\int \psi^* \hat{A} \psi d^3r \tag{4.27}$$

で与えられる．

もし演算子 $\hat{A}$ の固有関数が完全系をなしていれば，任意の波動関数 $\psi(\boldsymbol{r})$[1] は，

$$\psi(\boldsymbol{r})=\sum_i c_i\varphi_i(\boldsymbol{r}) \tag{4.28}$$

の形で展開できる．直交規格化条件 (4.24) を用いれば，(4.28) の展開係数は，

$$c_i=\int \varphi_i{}^*(\boldsymbol{r})\psi(\boldsymbol{r})d^3r \tag{4.29}$$

1)　$\psi(\boldsymbol{r})$ とは，任意の波動関数 $\psi(\boldsymbol{r}, t)$ において t をある時刻 t_0 に固定した波動関数を表すものとする．

と決まる．これを(4.27)に代入し，(4.19)，(4.24)を使えば，

$$\langle A \rangle = \sum_i a_i |c_i|^2 \tag{4.30}$$

を得る．同じようにして，

$$\int \psi^*(\boldsymbol{r})\psi(\boldsymbol{r})d^3r = \sum_i |c_i|^2 = 1 \tag{4.31}$$

となる．(4.30)，(4.31)より，(4.28)の各係数の絶対値の 2 乗 $|c_i|^2$ は，状態 ψ で物理量 A を測定したときに a_i という値を得る確率を与えることがわかる．これを確率関数とよぶ．

任意の関数を展開できる固有関数の全体 $\{\varphi_i\}$ を完全系という．物理量の演算子は，その固有値が実数であり，かつその固有関数系は完全系をなしていなくてはならない．これらの条件をみたす演算子を Dirac にしたがって**オブザーバブル**(観測可能量)という．ある演算子がオブザーバブルか否かの厳密な数学的証明は一般には難しいが，多くの場合は物理的直感に基づいて判断することができる．ある演算子 $\hat{A}$ がオブザーバブルであるためには，それがエルミートであることが必要である．

完全性

c_i を(4.29)のように表しておいて，それぞれ，もとの(4.28)にもう一度代入すれば，

$$\psi(\boldsymbol{r}) = \sum_i \left[\int \varphi_i^*(\boldsymbol{r}')\psi(\boldsymbol{r}')d^3r'\right]\varphi_i(\boldsymbol{r}) \tag{4.32}$$

となる．$\sum_i$ と $\int d^3r'$ の順序を交換すると，

$$\psi(\boldsymbol{r}) = \int \psi(\boldsymbol{r}')[\sum_i \varphi_i(\boldsymbol{r})\varphi_i^*(\boldsymbol{r}')]d^3r' \tag{4.33}$$

となる．(4.33)は，$\sum_i \varphi_i(\boldsymbol{r})\varphi_i^*(\boldsymbol{r}') = F(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}')$ が，任意の関数 $\psi(\boldsymbol{r})$ に対して，

$$\psi(\boldsymbol{r}) = \int \psi(\boldsymbol{r}')F(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}')d^3r' \tag{4.34}$$

をみたすことを意味しているから，

$$F(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}') = \delta(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}') \tag{4.35}$$

であることがわかる．したがって，

$$\sum_i \varphi_i(\boldsymbol{r})\varphi_i^*(\boldsymbol{r}') = \delta(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}') \tag{4.36}$$

を得る．(4.36)が直交規格化関数 $\varphi_i(\boldsymbol{r})$ の**完全性**を表している．逆に，直交規格化関数系 $\{\varphi_i(\boldsymbol{r})\}$ が(4.36)をみたしていれば，$\{\varphi_i(\boldsymbol{r})\}$ は**基底**を構成することがわかる．すなわち，任意の関数 $\psi(\boldsymbol{r})$ は，

$$\psi(\boldsymbol{r})=\int\psi(\boldsymbol{r}')\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')d^3r' \tag{4.37}$$

と書けるから，$\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')$ に対して(4.36)を代入すると(4.33)が得られる．ここで $\int d^3r'$ と $\sum_i$ を入れかえると(4.32)になる．この方程式は，$\psi(\boldsymbol{r})$ が常に $\varphi_i(\boldsymbol{r})$ で展開できることを示している．

［問題3］　第2章(2.5節)において，エネルギーの期待値を計算するときにも，演算子 $i\hbar\frac{\partial}{\partial t}$ を $\psi^*(\boldsymbol{r})$ と $\psi(\boldsymbol{r})$ との間にはさみ，ψ のほうだけに演算子が作用するものとして $\boldsymbol{r}$ について積分すればよいことを仮定した((2.62)参照)．ここでは，本節の方法を用い，確率関数からエネルギーの期待値を計算して，上の仮定を裏付けよ．

［解］　(4.30)より，

$$\langle E\rangle=\sum_i\int E_i\varphi_i{}^*(\boldsymbol{r})\psi(\boldsymbol{r})d^3r\int\varphi_i(\boldsymbol{r}')\psi^*(\boldsymbol{r}')d^3r' \quad ⓐ$$

$E_i\varphi_i=\hat{H}\varphi_i$ の複素共役でおきかえ，はじめの積分に2度部分積分を繰り返し，表面積分をおとすと，

$$\int E_i\varphi_i{}^*(\boldsymbol{r})\psi(\boldsymbol{r})d^3r=\int\varphi_i{}^*(\boldsymbol{r})\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta+V(\boldsymbol{r})\right]\psi(\boldsymbol{r})d^3r \quad ⓑ$$

ⓑをⓐに代入し，完全性の性質(4.36)を使うと，ⓐは，

$$\begin{aligned}\langle E\rangle&=\int\psi^*(\boldsymbol{r})\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta+V(\boldsymbol{r})\right]\psi(\boldsymbol{r})d^3r\\&=\int\psi^*(\boldsymbol{r})i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(\boldsymbol{r})d^3r\end{aligned} \quad ⓒ$$

となる．これによって仮定が裏づけられた．　▮

4.4　エルミート演算子の固有関数の性質 II
― 連続スペクトルの場合

これまで，固有関数は2乗積分可能な性質をもつことを要求した．しかしながら，運動量演算子 $(\hbar/i)\nabla$ のような場合には，2乗積分可能であるような固有関数をもっていない．すなわち，運動量の固有関数は，

$$\frac{\hbar}{i}\nabla\varphi_{\boldsymbol{p}}(\boldsymbol{r})=\boldsymbol{p}\varphi_{\boldsymbol{p}}(\boldsymbol{r}) \tag{4.38}$$

の解であり，

$$\varphi_{\boldsymbol{p}}(\boldsymbol{r})=C_{\boldsymbol{p}}e^{\frac{i\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}}{\hbar}} \tag{4.39}$$

となるので，$\int|\varphi_{\boldsymbol{p}}(\boldsymbol{r})|^2d^3r$ は発散する．この積分が発散するのは，$|\varphi_{\boldsymbol{p}}(\boldsymbol{r})|^2$ が無限

遠でゼロにならないという事情によっている．したがって，粒子が状態 $\varphi_p(\boldsymbol{r})$ にあれば，それは系の無限遠への運動が対応しており，固有値 $\boldsymbol{p}$ は連続スペクトルをつくる．しかも，任意の波動関数 $\psi(\boldsymbol{r})$ は Fourier の積分公式で明らかなように，固有関数 $\varphi_p(\boldsymbol{r})$ で展開できる．

連続スペクトルをもつ固有関数による展開

そこで，固有値が連続スペクトルをもつ演算子 $\hat{A}$ の固有関数の性質を調べてみよう．この場合，固有関数 w_α は，

$$\hat{A}w_\alpha=\alpha w_\alpha \tag{4.40}$$

を満足する．固有値は連続スペクトル α をもつから，任意の波動関数 $\psi(\boldsymbol{r})$ を，

$$\psi(\boldsymbol{r})=\int c(\alpha)w_\alpha(\boldsymbol{r})d\alpha \tag{4.41}$$

の形に展開できる．これは4.3節の(4.28)に相当している．いま，$\hat{A}$ の期待値が

$$\langle A\rangle=\int\psi^*\hat{A}\psi d^3r=\int\alpha|c(\alpha)|^2d\alpha \tag{4.42}$$

になると要求する．すると，(4.31)に相当した式は，

$$\int\psi^*(\boldsymbol{r})\psi(\boldsymbol{r})d^3r=\int|c(\alpha)|^2d\alpha=1 \tag{4.43}$$

となる．すなわち，連続スペクトルをもつ固有関数 $w_\alpha(\boldsymbol{r})$ を，状態 ψ で物理量 A が区間 $(\alpha,\ \alpha+d\alpha)$ のなかの値をとる確率が $|c(\alpha)|^2d\alpha$ で与えられるように選ぶことができる．(4.41)を $\int\psi^*\hat{A}\psi d^3r$ に代入して(4.42)の右辺になるためには，連続スペクトルの部分に対して，

$$\int w_{\alpha'}^*(\boldsymbol{r})w_{\alpha''}(\boldsymbol{r})d^3r=\delta(\alpha'-\alpha'') \tag{4.44}$$

でなければならない．この直交規格化条件を使うと，(4.41)の展開係数 $c(\alpha)$ は，

$$c(\alpha)=\int w_\alpha^*(\boldsymbol{r})\psi(\boldsymbol{r})d^3r \tag{4.45}$$

となる．

δ 関数を用いた規格化

(4.44)は，連続スペクトルの固有関数の規格化の条件である．(4.44)から，$\alpha'\neq\alpha''$ ならば連続スペクトルをもつ演算子の固有関数は直交し，$\alpha'=\alpha''$ ならば(4.44)の積分は発散することがわかる．

例題 1 δ 関数を用いた規格化により，運動量固有関数を求めよ．

解 (4.39)より，

$$\varphi_p(\boldsymbol{r})=C_pe^{\frac{i\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}}{\hbar}} \tag{ⓐ}$$

したがって，

$$\int \varphi_{p'}^*(\boldsymbol{r})\varphi_p(\boldsymbol{r})d^3r = |C_p|^2 \int e^{\frac{i}{\hbar}(\boldsymbol{p}-\boldsymbol{p}')\cdot\boldsymbol{r}} d^3r$$

$$= (2\pi\hbar)^3 |C_p|^2 \delta(\boldsymbol{p}-\boldsymbol{p}') \qquad ⓑ$$

直交規格化条件(4.44)にしたがって，$(2\pi\hbar)^3|C_p|^2=1$ だから，

$$|C_p| = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{\frac{3}{2}}}$$

とくに，C_p はすべて正の数の実数であるとすると，

$$\varphi_p(\boldsymbol{r}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{\frac{3}{2}}} e^{\frac{i\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}}{\hbar}} \qquad ⓒ$$

が得られる．

例題 2　座標演算子 $\hat{\boldsymbol{r}}$ も連続スペクトルをもっている．δ 関数を用いた規格化により，$\hat{\boldsymbol{r}}$ の固有関数を求めよ．

解　座標演算子 $\hat{\boldsymbol{r}}$ を関数に作用させるには，単にこの関数に $\boldsymbol{r}$ をかければよいから，

$$\hat{\boldsymbol{r}}\psi_{r'}(\boldsymbol{r}) = \boldsymbol{r}'\psi_{r'}(\boldsymbol{r}) \qquad ⓐ$$

$$\therefore \quad \psi_{r'}(\boldsymbol{r}) = C_{r'}\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}') \qquad ⓑ$$

したがって，

$$\int \psi_{r''}^*(\boldsymbol{r})\psi_{r'}(\boldsymbol{r})d^3r = |C_{r'}|^2 \int \delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'')\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')d^3r$$

$$= |C_{r'}|^2 \delta(\boldsymbol{r}''-\boldsymbol{r}') \qquad ⓒ$$

とくに，ⓑにおいて $C_{r'}=1$ とおけば，直交規格化固有関数が得られる．　■

完全性

とびとびのスペクトルの場合と同様に，$c(\alpha)$ を(4.45)のように表し，(4.41)にもう一度代入すれば，

$$\psi(\boldsymbol{r}) = \int \left\{ \int w_\alpha^*(\boldsymbol{r}')\psi(\boldsymbol{r}')d^3r' \right\} w_\alpha(\boldsymbol{r})d\alpha$$

となる．$\int d^3r'$ と $\int d\alpha$ の順序を入れかえると，

$$\psi(\boldsymbol{r}) = \int \psi(\boldsymbol{r}') \left\{ \int w_\alpha(\boldsymbol{r})w_\alpha^*(\boldsymbol{r}')d\alpha \right\} d^3r'$$

したがって，

$$\int w_\alpha(\boldsymbol{r})w_\alpha^*(\boldsymbol{r}')d\alpha = \delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}') \qquad (4.46)$$

という完全性の条件を得る．$w_\alpha(\boldsymbol{r})$ が(4.46)をみたしていれば，$\psi(\boldsymbol{r})$ が常に $w_\alpha(\boldsymbol{r})$

で展開できることがわかる．

例題 3　運動量固有関数は，完全性をみたすことを示せ．

解　運動量固有関数 $\varphi_{\boldsymbol{p}}(\boldsymbol{r})=\dfrac{1}{(2\pi\hbar)^{\frac{3}{2}}}e^{\frac{i\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}}{\hbar}}$ を使って，(4.46)の左辺に相当する積分を計算すると，

$$\begin{aligned}&\int\varphi_{\boldsymbol{p}}(\boldsymbol{r})\varphi_{\boldsymbol{p}}^*(\boldsymbol{r}')d^3p\\&=\frac{1}{(2\pi\hbar)^3}\int e^{\frac{i\boldsymbol{p}\cdot(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')}{\hbar}}d^3p\\&=\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')\end{aligned}\qquad ⓐ$$

となり，完全性の関係をみたしていることがわかる．　∎

箱を用いた規格化

連続スペクトルの固有関数について計算を実行するのに，箱を用いた量子化の方法がある．これらの関数を任意に大きい，しかし有限な体積 L^3 の立方体の箱に制限し，それぞれの壁のところで周期的境界条件を課すと，人為的に，連続スペクトルをとびとびのスペクトルにかえることができる．あとで $L\to\infty$ の極限に移行すれば，δ 関数を用いた規格化の場合と同じ結果が得られる．L が十分に大きい場合には，上の立方体のなかで動いている粒子のふるまいに及ぼす境界条件の影響は非常に小さくなる．したがって，境界条件は任意に，できるだけ簡単な形に選んでおく．最も多く用いられる境界条件は，波動関数が，

$$\psi(x,y,z)=\psi(x+L,y,z)=\psi(x,y+L,z)=\psi(x,y,z+L)\qquad(4.47)$$

をみたす周期的境界条件である．したがって，

$$\varphi_{\boldsymbol{p}}(\boldsymbol{r})=\frac{1}{L^{\frac{3}{2}}}e^{\frac{i\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}}{\hbar}}\qquad(4.48)$$

$$p_x=\frac{2\pi\hbar}{L}n_x,\quad p_y=\frac{2\pi\hbar}{L}n_y,\quad p_z=\frac{2\pi\hbar}{L}n_z\qquad(4.49)$$

のようにとれば，(4.47)の条件が満足される．ここで，n_x, n_y, n_z は正または負の整数である．

また，(4.49)をみたし，p の許された値の全体に対応する(4.48)の $\varphi_{\boldsymbol{p}}(\boldsymbol{r})$ の集合は，

$$\int_{L^3}\varphi_{\boldsymbol{p}'}^*(\boldsymbol{r})\varphi_{\boldsymbol{p}}(\boldsymbol{r})d^3r=\delta_{\boldsymbol{p}'\boldsymbol{p}}\qquad(4.50)$$

をみたす関数系になっている．この記法は，$n'\neq n$ なら $\delta_{n'n}=0$，$n'=n$ なら $\delta_{n'n}=1$ を意味している．$L\to\infty$ の極限をとると，たがいに隣接する 2 つの $\boldsymbol{p}$ の値の差は 0

に近づくので，無限空間のなかの粒子の自由運動に帰着する．

(4.48)の関数はまた完全系をつくっており，領域 L^3 のなかの粒子の任意の運動の状態を記述する波動関数は，

$$\psi(\boldsymbol{r})=\sum_{\boldsymbol{p}} c_{\boldsymbol{p}}\varphi_{\boldsymbol{p}}(\boldsymbol{r}) \tag{4.51}$$

の形に展開できる．直交規格化関数 $\varphi_{\boldsymbol{p}}(\boldsymbol{r})$ が完全性

$$\sum_{\boldsymbol{p}}\varphi_{\boldsymbol{p}}(\boldsymbol{r})\varphi_{\boldsymbol{p}}^*(\boldsymbol{r}')=\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}') \tag{4.52}$$

をみたすことは容易に確かめられる(各自，試みよ)．

例題 4　一辺 L の立方体の箱を用いた規格化の方法を使って，第 2 章(2.55)で予想した

$$\langle\boldsymbol{p}\rangle=\int\psi^*(\boldsymbol{r})\left(\frac{\hbar}{i}\nabla\right)\psi(\boldsymbol{r})d^3r$$

のように，運動量演算子 $\dfrac{\hbar}{i}\nabla$ を $\psi^*(\boldsymbol{r})$ と $\psi(\boldsymbol{r})$ の間にはさみ，$\psi(\boldsymbol{r})$ のほうだけに演算子が作用するものとして，$\boldsymbol{r}$ について積分すればよいことを示せ．

解　(4.51)，(4.50)より，

$$c_{\boldsymbol{p}}=\int\varphi_{\boldsymbol{p}}^*(\boldsymbol{r})\psi(\boldsymbol{r})d^3r \tag{ⓐ}$$

であるから，

$$\langle\boldsymbol{p}\rangle=\sum_{\boldsymbol{p}}c_{\boldsymbol{p}}^*\boldsymbol{p}c_{\boldsymbol{p}} \tag{ⓑ}$$

により運動量の期待値が求められる．ⓑにⓐの $c_{\boldsymbol{p}}$ の値を代入し，(4.38)を用いると，

$$\begin{aligned}\langle\boldsymbol{p}\rangle&=\sum_{\boldsymbol{p}}\int_{L^3}\varphi_{\boldsymbol{p}}(\boldsymbol{r}')\psi^*(\boldsymbol{r}')d^3r'\int_{L^3}\boldsymbol{p}\varphi_{\boldsymbol{p}}^*(\boldsymbol{r})\psi(\boldsymbol{r})d^3r\\&=-\frac{\hbar}{i}\sum_{\boldsymbol{p}}\int_{L^3}\varphi_{\boldsymbol{p}}(\boldsymbol{r}')\psi^*(\boldsymbol{r}')d^3r'\int_{L^3}\nabla\varphi_{\boldsymbol{p}}^*(\boldsymbol{r})\psi(r)d^3r\end{aligned} \tag{ⓒ}$$

周期的境界条件(4.47)より，$\psi(\boldsymbol{r})$ および $\varphi_{\boldsymbol{p}}(\boldsymbol{r})$ の値が立方体 L^3 の境界上で等しいから，部分積分によって，

$$\int_{L^3}\nabla\varphi_{\boldsymbol{p}}^*(\boldsymbol{r})\psi(\boldsymbol{r})d^3r=-\int_{L^3}\varphi_{\boldsymbol{p}}^*(\boldsymbol{r})\nabla\psi(\boldsymbol{r})d^3r \tag{ⓓ}$$

となる．ⓓをⓒに代入して書きなおし，(4.52)を使うと，

$$\begin{aligned}\langle\boldsymbol{p}\rangle&=\frac{\hbar}{i}\int_{L^3}\psi^*(\boldsymbol{r}')\left[\sum_{\boldsymbol{p}}\varphi_{\boldsymbol{p}}(\boldsymbol{r}')\varphi_{\boldsymbol{p}}^*(\boldsymbol{r})\right]\nabla\psi(\boldsymbol{r})d^3rd^3r'\\&=\int_{L^3}\psi^*(\boldsymbol{r})\frac{\hbar}{i}\nabla\psi(\boldsymbol{r})d^3r\end{aligned} \tag{ⓔ}$$

が得られる．ⓔは $L\to\infty$ の極限でも形を変えないから，運動量の期待値の計算を用

いる規則は，無限空間の一般の場合にも成り立つ． ∎

一般の場合の固有関数による級数展開

とびとびのスペクトルと，連続スペクトルの両方をもっているような演算子も存在する．この場合には，連続スペクトルの固有関数 w_α は，とびとびのスペクトルの固有関数 φ_i と直交している．この場合，関数の完全系は，両スペクトルの固有関数をあわせたものの全体となる．したがって，この種の演算子の固有関数で任意の波動関数を展開すれば，

$$\psi(\boldsymbol{r})=\sum_i c_i\varphi_i(\boldsymbol{r})+\int c(\alpha)w_\alpha(\boldsymbol{r})d\alpha \tag{4.53}$$

となる．波動関数 $\psi(\boldsymbol{r})$ が1に規格化されているならば，

$$\int\psi^*(\boldsymbol{r})\psi(\boldsymbol{r})d^3r=\sum_i|c_i|^2+\int|c(\alpha)|^2d\alpha=1 \tag{4.54}$$

となる．完全性の条件は，

$$\sum_i\varphi_i(\boldsymbol{r})\varphi_i^*(\boldsymbol{r}')+\int w_\alpha(\boldsymbol{r})w_\alpha^*(\boldsymbol{r}')d\alpha=\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}') \tag{4.55}$$

である．

［問題 4］ 運動量固有関数を一辺 L の立方体の箱ではなく，L_x, L_y, L_z の辺をもつ直方体の箱のなかで規格化を行うとき，どのような変更が必要か．

［解］ (4.47)の周期的境界条件は，

$$\psi(x,y,z)=\psi(x+L_x,y,z)=\psi(x,y+L_y,z)=\psi(x,y,z+L_z) \tag{a}$$

となる．したがって(4.48)の運動量の固有関数は，

$$\varphi_{\boldsymbol{p}}(\boldsymbol{r})=\frac{1}{(L_xL_yL_z)^{\frac{1}{2}}}e^{\frac{i\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}}{\hbar}} \tag{b}$$

(4.49)は，$p_x=\dfrac{2\pi\hbar}{L_x}n_x$，$p_y=\dfrac{2\pi\hbar}{L_y}n_y$，$p_z=\dfrac{2\pi\hbar}{L_z}n_z$ ⓒ

となる．ゆえに，

$$\int_{L_xL_yL_z}\varphi_{\boldsymbol{p}'}^*(\boldsymbol{r})\varphi_{\boldsymbol{p}}(\boldsymbol{r})d^3r=\delta_{\boldsymbol{p}',\boldsymbol{p}} \tag{d}$$

が成り立つ．この直交規格化関数が完全性(4.52)をみたすことも明らかである．$L_x, L_y, L_z\to\infty$ の極限をとると，δ 関数を用いた規格化に帰着する． ∎

4.5 波動関数の空間

ここでは，波動関数の空間という概念を導入しておこう．

いま，とびとびのスペクトルをもっているような演算子がある場合，任意の波動関数の展開は(4.28)で与えられることがわかった．つまり，

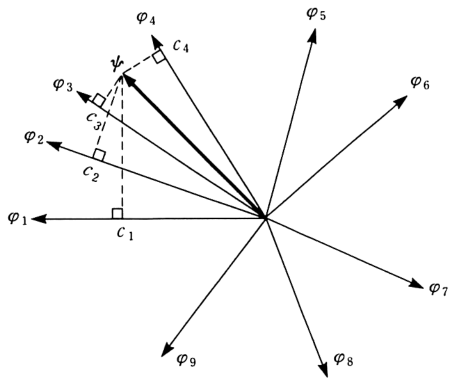


図4.1　ψ の直交座標系 $\varphi_1, \varphi_2, \cdots$への射影

$$\psi(\boldsymbol{r}) = \sum_i c_i \varphi_i(\boldsymbol{r})$$

の形のとびとびの固有値をもつ固有関数で展開される．N 次元ベクトル空間とこの波動関数の空間との間には，きわめて大きな類似点が存在する．

1．N 次元ベクトル空間で，任意のベクトル $\boldsymbol{A}$ は，

$$\boldsymbol{e}_i \cdot \boldsymbol{e}_j = \delta_{ij} \tag{4.56}$$

をみたす直交単位ベクトル $\boldsymbol{e}_i$ を使って，

$$\boldsymbol{A} = \sum_i a_i \boldsymbol{e}_i \tag{4.57}$$

と展開できた．(4.28)は，まさに(4.57)の拡張になっている．すなわち，(4.56)に対応するのは(4.24)で，

$$\int \varphi_i^* \varphi_j d^3 r = \delta_{ij}$$

$a_i = \boldsymbol{e}_i \cdot \boldsymbol{A}$ に対応するのは，(4.29)

$$c_i = \int \varphi_i^*(\boldsymbol{r}) \psi(\boldsymbol{r}) d^3 r$$

で，$\psi(\boldsymbol{r})$ の $\varphi_i(\boldsymbol{r})$ への射影になっている．したがって図4.1に示したように，$\psi(\boldsymbol{r})$ をこの関数空間でのベクトルとみなしてもよい．

2．N 次元ベクトル空間では，

(i) ベクトルと数の積は，やはりベクトルである．

(ii) 2つのベクトルの和は，ベクトルになる．

$$\boldsymbol{A} + \boldsymbol{B} = \boldsymbol{C} \tag{4.58}$$

いま考えている関数空間では，(i)，(ii)に対応して，

(i)′ 2乗積分可能な関数と任意の複素数の積は，やはり，2乗積分可能な関数である．

(ii)′ 2つの2乗積分可能な関数の和も，2乗積分可能な関数になる．

例題 $\psi_1(\boldsymbol{r})$, $\psi_2(\boldsymbol{r})$ が2乗積分可能な関数ならば，$\psi(\boldsymbol{r})=\lambda_1\psi_1(\boldsymbol{r})+\lambda_2\psi_2(\boldsymbol{r})$ も2乗積分可能であることを示せ．ただし，λ_1，λ_2 は任意の複素数とする．

解 $$|\psi(\boldsymbol{r})|^2=|\lambda_1|^2|\psi_1(\boldsymbol{r})|^2+|\lambda_2|^2|\psi_2(\boldsymbol{r})|^2 + \lambda_1{}^*\lambda_2\psi_1{}^*(\boldsymbol{r})\psi_2(\boldsymbol{r})+\lambda_1\lambda_2{}^*\psi_1(\boldsymbol{r})\psi_2{}^*(\boldsymbol{r}) \tag{ⓐ}$$

ところで，

$$|\psi_1||\psi_2|\leqq\frac{1}{2}(|\psi_1|^2+|\psi_2|^2) \tag{ⓑ}$$

であるから，ⓐの右辺の最後の2項の和の絶対値は，

$$|\lambda_1||\lambda_2|[|\psi_1(\boldsymbol{r})|^2+|\psi_2(\boldsymbol{r})|^2] \tag{ⓒ}$$

でおさえられる．したがって，$\psi(\boldsymbol{r})$ が2乗積分可能であることは明らかである．■

3. N 次元ベクトル空間では，$\boldsymbol{C}$ と $\boldsymbol{D}$ の内積は，

$$\boldsymbol{C}\cdot\boldsymbol{D}=\sum_{i=1}^{N}c_id_i \tag{4.59}$$

で定義される．いま考えている関数空間では，

$$\int\psi_1^*(\boldsymbol{r})\psi_2(\boldsymbol{r})d^3r \tag{4.60}$$

が内積として定義される．ゆえに，対応したベクトル空間をつくる．唯一の違いは，量子力学では，ベクトル空間が無限次元だということである．したがって，$\psi(\boldsymbol{r})$ をこの無限次元空間でのベクトルとみなすことができる．

4.6　1つの状態で複数の物理量が決まった値をとるための条件

4.2節で，状態 ψ で記述される波動関数が演算子 $\hat{A}$ の固有関数と一致していれば，その状態では物理量 A がはっきり決まった値をとることがわかった．波動関数が，同時に複数の演算子の固有状態であれば，この状態でこれらの演算子に対応した物理量は，すべて決まった値をとることになる．

もし，2つの物理量 A, B が同時に定まった値をとるならば，それらの演算子 $\hat{A}$，$\hat{B}$ は可換であることを示そう．この場合，それぞれ固有関数は，$\hat{A}$ の固有値 a_i，$\hat{B}$ の固有値 b_j によって，

$$\hat{A}\varphi_{a_ib_j}=a_i\varphi_{a_ib_j} \tag{4.61 a}$$

$$\hat{B}\varphi_{a_ib_j}=b_j\varphi_{a_ib_j} \tag{4.61 b}$$

と表される．$\hat{A}$ を(4.61 b)に左から作用させ，$\hat{B}$ を(4.61 a)に左から作用させ，辺々引き算をすると，

$$(\hat{A}\hat{B}-\hat{B}\hat{A})\varphi_{a_i b_j}=0 \tag{4.62}$$

が得られる．この関係式が，完全系をなすすべての関数に対して成り立つならば，

$$\hat{A}\hat{B}-\hat{B}\hat{A}=[\hat{A},\ \hat{B}]=0 \tag{4.63}$$

が成り立たなければならない．これで，複数個の物理量が，ある状態で同時にきまった値をとるためには，$\hat{A}$ と $\hat{B}$ は可換でなければならないことが証明された．

逆に，次の定理も成り立つ．

定理　$\hat{A}$ と $\hat{B}$ が2つの交換するエルミート演算子であるとき，共通の固有関数のセットを選ぶことができる．

証明　両方の演算子の固有値に縮退がなければ，とくに簡単である．等式(4.63)が成立し，φ_{ab} が演算子 $\hat{B}$ の完全な固有関数系をなしていて，

$$\hat{B}\varphi_{ab}=b\varphi_{ab}$$

としよう．この両辺に，左側から $\hat{A}$ を作用させ，(4.63)を使うと，

$$\hat{A}\hat{B}\varphi_{ab}=\hat{B}\hat{A}\varphi_{ab}=b\hat{A}\varphi_{ab}$$

ゆえに，$\hat{A}\varphi_{ab}$ は固有値 b をもつ $\hat{B}$ の固有関数である．いま，固有値 b に対して $\hat{B}$ の固有関数がただ1個の場合は，

$$\hat{A}\varphi_{ab}\propto\varphi_{ab}$$

$$\therefore\quad \hat{A}\varphi_{ab}=a\varphi_{ab}$$

と書くことができる．したがって，φ_{ab} は同時に $\hat{A}$ と $\hat{B}$ の固有関数になっている．

つぎに，演算子が縮退した固有値をもっている場合を考えよう．$\hat{B}$ の固有値を b とし，これに対して n 個の独立な固有関数 $\varphi_{b,i}\,(i=1,2,\cdots,n)$ があると仮定する．つまり，

$$\hat{B}\varphi_{b,i}=b\varphi_{b,i} \tag{4.64}$$

左側から $\hat{A}$ を作用させて，(4.63)を使うと，

$$\hat{A}\hat{B}\varphi_{b,i}=\hat{B}\hat{A}\varphi_{b,i}=b\hat{A}\varphi_{b,i}$$

を得る．これは，$\hat{A}\varphi_{b,i}$ が固有値 b をもった $\hat{B}$ の固有関数になっていることを示している．

$$\therefore\quad \hat{A}\varphi_{b,i}=\sum_{j=1}^{n}c_{ij}\varphi_{b,j} \tag{4.65}$$

一般には，(4.65)から $\varphi_{b,j}$ が $\hat{A}$ の固有関数であると結論することはできない．しかし，固有値 b をもった $\hat{B}$ の固有関数 $\overline{\varphi}_{b,i}=\sum_{l=1}^{n}d_{il}\varphi_{b,l}$ で，かつ同時に $\hat{A}$ の固有関数

となる1次結合をつくることが常に可能であることは証明できる．　■

この定理は，可換な演算子に対する物理量の同時測定はたがいに干渉しあわないことを意味している．

4.7　量子力学における演算子法

Schrödinger 方程式の解法として，Dirac によるエレガントな演算子法を解説しておこう．この方法は，4.6 節の波動関数の空間の簡明な具体例にもなっている．ここでは，簡単な例題として，3.7 節の1次元調和振動子の問題を演算子法で解いてみることにする．

演算子法によるエネルギー固有値

まず，演算子

$$\hat{a}=\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\left(\hat{x}+\frac{i\hat{p}}{m\omega}\right) \tag{4.66}$$

$$\hat{a}^{\dagger}=\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\left(\hat{x}-\frac{i\hat{p}}{m\omega}\right) \tag{4.67}$$

を導入しよう．$\hat{x}$，$\hat{p}$ はエルミートだから，$\hat{a}^{\dagger}$ は $\hat{a}$ にエルミート共役である．

量子力学の基本的な交換関係(2.67)

$$[x, \hat{p}]=i\hbar \tag{4.68}$$

を用いると，容易に，

$$[\hat{a}, \hat{a}^{\dagger}]=\frac{m\omega}{2\hbar}\left(-\frac{i}{m\omega}[\hat{x}, \hat{p}]+\frac{i}{m\omega}[\hat{p}, \hat{x}]\right)=1 \tag{4.69}$$

が得られる．さらに，**個数演算子**

$$\hat{N}\equiv\hat{a}^{\dagger}\hat{a} \tag{4.70}$$

も定義しよう．これは明らかにエルミートであり，

$$\begin{aligned}\hat{a}^{\dagger}\hat{a}&=\frac{m\omega}{2\hbar}\left(\hat{x}-\frac{i\hat{p}}{m\omega}\right)\left(\hat{x}+\frac{i\hat{p}}{m\omega}\right)\\&=\frac{m\omega}{2\hbar}\left(\hat{x}^2+\frac{\hat{p}^2}{m^2\omega^2}-\frac{i}{m\omega}[\hat{p}, \hat{x}]\right)\\&=\frac{\hat{H}}{\hbar\omega}-\frac{1}{2}\end{aligned} \tag{4.71}$$

$$\therefore\quad \hat{H}=\hbar\omega\left(\hat{a}^{\dagger}\hat{a}+\frac{1}{2}\right)=\hbar\omega\left(\hat{N}+\frac{1}{2}\right) \tag{4.72}$$

したがって，$\hat{H}$ の固有値を求める問題は，$\hat{N}$ の固有値を求める問題に帰着する．

いま，$\hat{N}$ の固有関数を固有値 n を使って φ_n で表すと，

$$\hat{N}\varphi_n=n\varphi_n \tag{4.73}$$

となる．まず，$\hat{a}$，$\hat{a}^\dagger$，$\hat{N}$ の物理的意味を調べておこう．(4.69)を用いると，

$$\begin{aligned}\hat{N}\hat{a}\varphi_n &= \hat{a}^\dagger\hat{a}\hat{a}\varphi_n \\ &= (\hat{a}\hat{a}^\dagger - 1)\hat{a}\varphi_n \\ &= (n-1)\hat{a}\varphi_n\end{aligned} \tag{4.74}$$

したがって，$\hat{a}\varphi_n$ は固有値 $n-1$ をもつ $\hat{N}$ の固有関数である．このように，$\hat{a}$ は n を1つだけさげる演算子なので，$\hat{a}$ を**消滅演算子**とよぶ．同様にして，

$$\hat{N}\hat{a}^\dagger\varphi_n = (n+1)\hat{a}^\dagger\varphi_n \tag{4.75}$$

となり，$\hat{a}^\dagger\varphi_n$ は固有値 $n+1$ をもつ $\hat{N}$ の固有関数であることがわかる．したがって，$\hat{a}^\dagger$ を**生成演算子**とよぶ．

$\hat{a}\varphi_n$ と φ_{n-1} は定数を別にすれば同じであるから，

$$\hat{a}\varphi_n = c\varphi_{n-1} \tag{4.76}$$

$\int_{-\infty}^{\infty}|\varphi_n(x)|^2dx=1$ と規格化しておくと，

$$\int_{-\infty}^{\infty}(\hat{a}\varphi_n)^*(\hat{a}\varphi_n)dx = \int_{-\infty}^{\infty}\varphi_n{}^*\hat{a}^\dagger\hat{a}\varphi_n dx = |c|^2\int_{-\infty}^{\infty}|\varphi_{n-1}|^2dx = |c|^2 \tag{4.77}$$

となる．一方，$\hat{a}^\dagger\hat{a}$ が個数演算子であることより，$\hat{a}^\dagger\hat{a}\varphi_n = n\varphi_n$ であるから $|c|^2=n$ となる．c を正の実数にとると，$c=\sqrt{n}$ となるので，

$$\hat{a}\varphi_n = \sqrt{n}\,\varphi_{n-1} \tag{4.78}$$

が得られる．同様にして，

$$\hat{a}^\dagger\varphi_n = \sqrt{n+1}\,\varphi_{n+1} \tag{4.79}$$

であることを容易に示すことができる．

例題　$\hat{N}$ の固有値は負でない整数であることを証明せよ．

解　(4.78)に $\hat{a}$ をかけると $\hat{a}^2\varphi_n = \sqrt{n(n-1)}\,\varphi_{n-2}$．したがって，$n$ を $\hat{N}$ の固有値とすれば，$n-1, n-2, n-3, \cdots$ はすべて $\hat{N}$ の固有値となる．もし，n が整数でなければ，$\hat{N}$ の固有値は負になりうる．ところが，

$$n = \int_{-\infty}^{\infty}\varphi_n{}^*\hat{a}^\dagger\hat{a}\varphi_n dx = \int_{-\infty}^{\infty}|\hat{a}\varphi_n|^2dx \geqq 0 \tag{ⓐ}$$

でなければならない．ゆえに，n は整数でなければならない．すなわち，許される n の値は負でない整数 $(n=0, 1, 2, 3, \cdots)$ と結論できる．■

また，(4.72)，(4.73)より，

$$\hat{H}\varphi_n = \left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega\varphi_n \tag{4.80}$$

が得られる．これは，エネルギー固有値 E_n が，

$$E_n=\left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega \qquad (n=0,1,2,3,\cdots) \tag{4.81}$$

で与えられることを示している.

演算子法によるエネルギー固有関数

演算子法は，調和振動子のエネルギー固有関数を求めるためにも有用である．まず，基底状態に $\hat{a}$ をかけると，

$$\hat{a}\varphi_0(x)=0 \tag{4.82}$$

$\hat{a}$ に(4.66)を代入すると，

$$\left(\hat{x}+\frac{i\hat{p}}{m\omega}\right)\varphi_0(x)=0$$

したがって，

$$x\varphi_0(x)+\frac{\hbar}{m\omega}\frac{\partial\varphi_0(x)}{\partial x}=0 \tag{4.83}$$

を得る．この式は $\varphi_0(x)$（基底状態の波動関数）を決めるための微分方程式であり，その解は，

$$\varphi_0(x)=\left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}}\exp\left(-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}\right) \tag{4.84}$$

となる．係数は，$\int_{-\infty}^{\infty}|\varphi_0(x)|^2dx=1$ となるように規格化した.

[問題 5]　(3.97)の無次元量 $\xi=\dfrac{x}{x_0}$ を導入する．ここで $x_0=\left(\dfrac{\hbar}{m\omega}\right)^{\frac{1}{2}}$ である.

(1) $\hat{a}$，$\hat{a}^\dagger$ を ξ で表せ.

(2) $\hat{a}\varphi_0(\xi)=0$ を解いて，規格化した $\varphi_0(\xi)$ を求めよ.

[解]　(1)　(4.66)より，

$$\hat{a}=\frac{1}{\sqrt{2}\,x_0}\left(\hat{x}+\frac{\hbar}{m\omega}\frac{\partial}{\partial x}\right)=\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\xi+\frac{\partial}{\partial\xi}\right) \quad ⓐ$$

(4.67)より，

$$\hat{a}^\dagger=\frac{1}{\sqrt{2}\,x_0}\left(\hat{x}-\frac{\hbar}{m\omega}\frac{\partial}{\partial x}\right)=\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\xi-\frac{\partial}{\partial\xi}\right) \quad ⓑ$$

(2) ⓐの $\hat{a}$ を用いて，$\hat{a}\varphi_0(\xi)=\dfrac{1}{\sqrt{2}}\left(\xi+\dfrac{\partial}{\partial\xi}\right)\varphi_0(\xi)=0$

$$\therefore\quad \varphi_0(\xi)=A_0\exp\left(-\frac{\xi^2}{2}\right) \quad ⓒ$$

$\varphi_0(\xi)$ を規格化するため，

$$1=\int_{-\infty}^{\infty}|\varphi_0(\xi)|^2d\xi=A_0{}^2\int_{-\infty}^{\infty}\exp(-\xi^2)d\xi=\sqrt{\pi}A_0{}^2$$

$$\therefore \quad A_0 = \pi^{-\frac{1}{4}} \qquad \therefore \quad \varphi_0(\xi) = \pi^{-\frac{1}{4}} \exp\left(-\frac{\xi^2}{2}\right) \qquad \text{ⓓ} \quad ■$$

[問題 6]　前問で得られた $\varphi_0(\xi)$ の解を使って，第1励起状態の波動関数を計算せよ．

[解]　第1励起状態は，$\varphi_1 = \hat{a}^\dagger \varphi_0$ で与えられる．したがって，[問題 5]のⓑを用いて，

$$\begin{aligned}\varphi_1(\xi) &= \hat{a}^\dagger \varphi_0(\xi) \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\xi - \frac{\partial}{\partial \xi}\right)\varphi_0(\xi) \\ &= A_1 2\xi \exp\left(-\frac{\xi^2}{2}\right)\end{aligned}$$

ここで，$A_1 = (2\sqrt{\pi})^{-\frac{1}{2}}$　■

[問題 7]　第 n 励起状態の波動関数を計算せよ．

[解]　第 n 励起状態は，

$$\begin{aligned}\varphi_n &= \frac{1}{\sqrt{n!}}(\hat{a}^\dagger)^n \varphi_0(\xi) \\ &= \frac{1}{\sqrt{n!}}\left\{\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\xi - \frac{\partial}{\partial \xi}\right)\right\}^n \pi^{-\frac{1}{4}} \exp\left(-\frac{\xi^2}{2}\right) \\ &= (2^n n! \sqrt{\pi})^{-\frac{1}{2}}\left(\xi - \frac{\partial}{\partial \xi}\right)^n \exp\left(-\frac{\xi^2}{2}\right) \qquad \text{ⓐ} \quad ■\end{aligned}$$

[問題 7] のⓐを計算すると，n 次の多項式 $H_n(\xi)$ を使って，

$$\left(\xi - \frac{\partial}{\partial \xi}\right)^n \exp\left(-\frac{\xi^2}{2}\right) = H_n(\xi) \exp\left(-\frac{\xi^2}{2}\right)$$

となる．この n 次の多項式 $H_n(\xi)$ を **Hermite 多項式**という．

[問題 8]　前問の結果を用いて，$H_0(\xi)$，$H_1(\xi)$，$H_2(\xi)$ を計算せよ．

[解]　$H_0(\xi) = 1$ は明らか．

$n=1$ とおくと，

$$\left(\xi - \frac{\partial}{\partial \xi}\right)\exp\left(-\frac{\xi^2}{2}\right) = 2\xi \exp\left(-\frac{\xi^2}{2}\right)$$

となる．

$$\therefore \quad H_1(\xi) = 2\xi$$

$n=2$ とおくと，

$$\left(\xi - \frac{\partial}{\partial \xi}\right)^2 \exp\left(-\frac{\xi^2}{2}\right) = (4\xi^2 - 2)\exp\left(-\frac{\xi^2}{2}\right)$$

$$\therefore \quad H_2(\xi) = 4\xi^2 - 2 \quad ■$$

けっきょく，n 番目の固有関数は，$\varphi_n=A_n\left(\xi-\dfrac{\partial}{\partial\xi}\right)^n\exp\left(-\dfrac{\xi^2}{2}\right)$ によって与えられる．

$$\varphi_n(\xi)=A_nH_n(\xi)\exp\left(-\frac{\xi^2}{2}\right) \tag{4.85}$$

と書くと，$H_n(\xi)$ は(3.105)の微分方程式をみたすことが容易に示される．

[問題 9]　1 次元の調和振動子について，

(1) 基底状態での $\hat{x}$ と $\hat{p}$ の期待値を計算せよ．

(2) 基底状態での $\hat{x}^2$ と $\hat{p}^2$ の期待値を計算せよ．

(3) 不確定性関係が，不確定さの積を最小にする形

$$\langle(\Delta x)^2\rangle\langle(\Delta p)^2\rangle=\frac{\hbar^2}{4}$$

がみたされていることを示せ．

(4) 第 n 励起状態での $\langle(\Delta x)^2\rangle\langle(\Delta p)^2\rangle$ の値を求めよ．

(5) 第 n 励起状態での運動エネルギーの期待値とポテンシャルエネルギーの期待値の間の関係を求めよ．

[解]　(1) (4.66)，(4.67) より，

$$\hat{x}=\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(\hat{a}+\hat{a}^\dagger) \tag{a}$$

$$\hat{p}=-i\sqrt{\frac{m\omega\hbar}{2}}(\hat{a}-\hat{a}^\dagger) \tag{b}$$

$$\therefore\quad \int_{-\infty}^{\infty}\varphi_0^*(x)\hat{x}\varphi_0(x)dx=\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\left\{\int_{-\infty}^{\infty}\varphi_0^*(x)(\hat{a}+\hat{a}^\dagger)\varphi_0(x)dx\right\}$$

$$\hat{a}\varphi_0(x)=0,\qquad \hat{a}^\dagger\varphi_0(x)=\varphi_1(x)$$

であるから，$\hat{x}$ の期待値は 0．

まったく同様にして，ⓑより $\hat{p}$ の期待値も 0 となる．

(2) $$\hat{x}^2=\frac{\hbar}{2m\omega}(\hat{a}^2+\hat{a}^{\dagger 2}+\hat{a}\hat{a}^\dagger+\hat{a}^\dagger\hat{a}) \tag{c}$$

$$\hat{p}^2=-\frac{m\omega\hbar}{2}(\hat{a}^2+\hat{a}^{\dagger 2}-\hat{a}\hat{a}^\dagger-\hat{a}^\dagger\hat{a}) \tag{d}$$

$$\begin{aligned}\therefore\quad \int_{-\infty}^{\infty}\varphi_0^*(x)\hat{x}^2\varphi_0(x)dx&=\frac{\hbar}{2m\omega}\int_{-\infty}^{\infty}\varphi_0^*(x)(\hat{a}^2+\hat{a}^{\dagger 2}+\hat{a}\hat{a}^\dagger+\hat{a}^\dagger\hat{a})\varphi_0(x)\\&=\frac{\hbar}{2m\omega}\int_{-\infty}^{\infty}(\hat{a}^\dagger\varphi_0)^*(\hat{a}^\dagger\varphi_0)dx\\&=\frac{\hbar}{2m\omega}=(\Delta x)^2\end{aligned} \tag{e}$$

同様にして，

$$\int_{-\infty}^{\infty}\varphi_0^*(x)\hat{p}^2\varphi_0(x)dx=\frac{m\omega\hbar}{2}=(\varDelta p)^2 \qquad ⓕ$$

(3) ⓔ, ⓕより，

$$(\varDelta x)^2(\varDelta p)^2=\frac{\hbar^2}{4}$$

$$\therefore \quad \varDelta x\cdot\varDelta p=\frac{\hbar}{2} \qquad ⓖ$$

(4) 第 n 励起状態では，

$$\hat{x}^2\varphi_n=\frac{\hbar}{2m\omega}\{\sqrt{n(n-1)}\,\varphi_{n-2}+(n+1)\varphi_n+n\varphi_n+\sqrt{(n+2)(n+1)}\,\varphi_{n+2}\} \qquad ⓗ$$

$$\therefore \quad \int_{-\infty}^{\infty}\varphi_n^*(x)\hat{x}^2\varphi_n(x)dx=\frac{\hbar}{2m\omega}\{(n+1)+n\}=\frac{\hbar}{m\omega}\left(n+\frac{1}{2}\right)=(\varDelta x)^2 \qquad ⓘ$$

$$\int_{-\infty}^{\infty}\varphi_n^*(x)\hat{p}^2\varphi_n(x)dx=-\frac{m\omega\hbar}{2}\{-(n+1)-n\}=m\omega\hbar\left(n+\frac{1}{2}\right)=(\varDelta p)^2 \qquad ⓙ$$

∴　第 n 励起状態では，

$$\langle(\varDelta x)^2\rangle\langle(\varDelta p)^2\rangle=\hbar^2\left(n+\frac{1}{2}\right)^2 \qquad ⓚ$$

となる．

(5) 第 n 励起状態では，(4)のⓘ，ⓙを用いて，

運動エネルギーの期待値　$\langle T\rangle=\langle\frac{p^2}{2m}\rangle=\frac{\hbar\omega}{2}\left(n+\frac{1}{2}\right)$

ポテンシャルエネルギーの期待値　$\langle V\rangle=\langle\frac{m\omega^2x^2}{2}\rangle=\frac{\hbar\omega}{2}\left(n+\frac{1}{2}\right)$

$$\therefore \quad \langle T\rangle=\langle V\rangle$$

すなわち，**ビリアル定理**が成り立つ．　▮

第4章　章　末　問　題

[1]　エルミート演算子 $\hat{A}$，$\hat{B}$ が非交換で，

$$[\hat{A},\ \hat{B}]=i\hat{C} \qquad ①$$

をみたすとき，次の問いに答えよ．

(1) $\hat{C}$ がエルミート演算子であることを証明せよ．

(2) $(\varDelta A)^2\equiv\int\psi^*(\hat{A}-\langle A\rangle)^2\psi d^3r$，$(\varDelta B)^2\equiv\int\psi^*(\hat{B}-\langle B\rangle)^2\psi d^3r$

であるとき，$\Delta A \cdot \Delta B \geqq \left| \frac{1}{2}\langle C \rangle \right|$ であることを証明せよ．

(3) (2)において等号が成り立つための条件は，

$(\hat{A}-\langle A \rangle)\psi = i\alpha(\hat{B}-\langle B \rangle)\psi$ となるような実数 α が存在することであることを示せ．また，そのときの α の値を求めよ．

[解] (1) ①のエルミート共役をとると，

$$(\hat{A}\hat{B})^\dagger - (\hat{B}\hat{A})^\dagger = -i\hat{C}^\dagger \quad \therefore \quad \hat{B}\hat{A} - \hat{A}\hat{B} = -i\hat{C}^\dagger$$

$$\therefore \quad [\hat{A},\ \hat{B}] = i\hat{C}^\dagger$$

これを①と比べると，$\hat{C}^\dagger = \hat{C}$.

(2) $\hat{A}$ はエルミート演算子であるから，

$$(\Delta A)^2 = \int [(\hat{A}-\langle A \rangle)\psi]^* (\hat{A}-\langle A \rangle)\psi d^3r$$

$$= \int |(\hat{A}-\langle A \rangle)\psi|^2 d^3r \qquad ⓐ$$

$(\Delta B)^2$ に関しても同様である．いま，Schwarz の不等式

$$\left(\int |f|^2 d^3r\right)\left(\int |g|^2 d^3r\right) \geqq \left| \int f^* g d^3r \right|^2 \qquad ⓑ$$

を用い，$f = (\hat{A}-\langle A \rangle)\psi$，$g = (\hat{B}-\langle B \rangle)\psi$ とおくと，

$$(\Delta A)^2(\Delta B)^2 \geqq \left| \int [(\hat{A}-\langle A \rangle)\psi]^* (\hat{B}-\langle B \rangle)\psi d^3r \right|^2$$

$$= \left| \int \psi^* (\hat{A}-\langle A \rangle)(\hat{B}-\langle B \rangle)\psi d^3r \right|^2 \qquad ⓒ$$

どのような演算子も，2つのエルミート演算子の線型結合で表せることを思い起こすと．

$$(\hat{A}-\langle A \rangle)(\hat{B}-\langle B \rangle) = \frac{(\hat{A}-\langle A \rangle)(\hat{B}-\langle B \rangle) + (\hat{B}-\langle B \rangle)(\hat{A}-\langle A \rangle)}{2}$$

$$+ i\frac{(\hat{A}-\langle A \rangle)(\hat{B}-\langle B \rangle) - (\hat{B}-\langle B \rangle)(\hat{A}-\langle A \rangle)}{2i}$$

$$= \hat{F} + \frac{i}{2}\hat{C} \qquad ⓓ$$

と書ける．これをⓒに代入すると，

$$(\Delta A)^2(\Delta B)^2 \geqq \left| \langle F \rangle + \frac{i}{2}\langle C \rangle \right|^2$$

$\hat{F}$ と $\hat{C}$ はエルミートであるから，$\langle F \rangle$ と $\langle C \rangle$ は実数．

$$\therefore \quad (\Delta A)^2(\Delta B)^2 \geqq \langle F \rangle^2 + \frac{1}{4}\langle C \rangle^2 \geqq \frac{1}{4}\langle C \rangle^2 \qquad ⓔ$$

(3) ⓑにおいて等式が成り立つのは，$f=\lambda g$ の場合で，

$$(\hat{A}-\langle A\rangle)\psi=\lambda(\hat{B}-\langle B\rangle)\psi \qquad ⓕ$$

この場合は，$(\varDelta A)^2(\varDelta B)^2=\langle F\rangle^2+\frac{1}{4}\langle C\rangle^2$ となる．さらに，$\langle F\rangle=0$ ならば題意をみたす．

$$\therefore\quad 0=\langle F\rangle=\frac{1}{2}\int[\psi^*(\hat{A}-\langle A\rangle)(\hat{B}-\langle B\rangle)\psi+\psi^*(\hat{B}-\langle B\rangle)(\hat{A}-\langle A\rangle)\psi]d^3r$$

$$=\frac{1}{2}\int(f^*g+g^*f)d^3r=\frac{1}{2}(\lambda^*+\lambda)\int g^*gd^3r \qquad ⓖ$$

$\int g^*gd^3r\neq 0$ であるから，$\lambda^*+\lambda=0$.

$$\therefore\quad \lambda=i\alpha \qquad (\alpha\in\boldsymbol{R})$$

$$\therefore\quad f=i\alpha g$$

すなわち，

$$(\hat{A}-\langle A\rangle)\psi=i\alpha(\hat{B}-\langle B\rangle)\psi \qquad ⓗ$$

となるような実数 α が存在する．ⓗの両辺の絶対値の2乗を全空間で積分すると，

$$\int|(\hat{A}-\langle A\rangle)\psi|^2d^3r=\alpha^2\int|(\hat{B}-\langle B\rangle)\psi|^2d^3r$$

$$\therefore\quad \alpha^2=\frac{(\varDelta A)^2}{(\varDelta B)^2}=\frac{1}{4}\frac{\langle C\rangle^2}{(\varDelta B)^4}$$

$$\therefore\quad \alpha=\frac{1}{2}\frac{|\langle C\rangle|}{(\varDelta B)^2} \qquad ⓘ$$

[2]　[1]の結果を用いて，不確定性関係，$\varDelta x\cdot\varDelta p\geqq\frac{1}{2}\hbar$ において等号が成り立つのは，どのような形の ψ に対してであるかを調べよ．

[解]　[1]の問いにおいて，$\hat{A}=\hat{p}$, $\hat{B}=\hat{x}$ とおこう．$\hat{x}$, $\hat{p}$ の交換関係より $\hat{C}=-\hbar$.

したがって[1]のⓗ，ⓘより，

$$(\hat{p}-\langle p\rangle)\psi=\frac{i\hbar}{2(\varDelta x)^2}(\hat{x}-\langle x\rangle)\psi \qquad ⓐ$$

$$\therefore\quad \left(\frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx}-\langle p\rangle\right)\psi-\frac{i\hbar}{2(\varDelta x)^2}(\hat{x}-\langle x\rangle)\psi=0 \qquad ⓑ$$

この解は，

$$\psi(x)=N\exp\left[-\frac{(\hat{x}-\langle x\rangle)^2}{4(\varDelta x)^2}+\frac{i\langle p\rangle x}{\hbar}\right] \qquad ⓒ$$

となる．$\int_{-\infty}^{\infty}|\psi(x)|^2dx=1$ と規格化すると，$N=[2\pi(\varDelta x)^2]^{-\frac{1}{4}}$

［3］ $\hat{H}=\dfrac{\hat{p}^2}{2m}+\dfrac{m\omega^2}{2}\hat{x}^2$ で与えられる1次元の調和振動子を考えよう．波動関数を無次元量 $\xi=\left(\dfrac{m\omega}{\hbar}\right)^{\frac{1}{2}}x$ で表したとき，以下の問いに答えよ．

(1) 消滅演算子 $\hat{a}$ の固有値が λ であるような波動関数 $\varphi_\lambda(\xi)$ を，

$$\varphi_\lambda(\xi)=\sum_{n=0}^{\infty}c_n(\lambda)\varphi_n(\xi) \qquad ①$$

の形で表し，正しく規格化されるような係数 $c_n(\lambda)$ を決定せよ．ただし，$\varphi_n(\xi)$ は n 番目のエネルギー固有値に属する波動関数である．

(2) この量子状態におけるエネルギーの期待値を求めよ．

［解］ (1)［問題5］(111ページ) の(1)を参照すると，

$$\hat{a}=\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\hat{x}+i\sqrt{\frac{1}{m\hbar\omega}}\hat{p}\right)=\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x+\sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}\frac{\partial}{\partial x}\right)$$

$$=\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\xi+\frac{\partial}{\partial\xi}\right) \qquad ⓐ$$

$$\hat{a}\varphi_\lambda(\xi)=\lambda\varphi_\lambda(\xi) \qquad ⓑ$$

に①を代入すると，

$$\sum_n c_n\hat{a}\varphi_n(\xi)=\sum_n c_n\sqrt{n}\,\varphi_{n-1}(\xi)=\lambda\sum_n c_n\varphi_n(\xi) \qquad ⓒ$$

φ_0 の係数を比較すると，$c_1\sqrt{1}=\lambda c_0$　　$\therefore\ c_1=\lambda c_0$

φ_1 の係数を比較すると，$c_2\sqrt{2}=\lambda c_1$　　$\therefore\ c_2=\dfrac{\lambda}{\sqrt{2}}c_1=\dfrac{\lambda^2}{\sqrt{2}}c_0$

⋮　　⋮　　⋮

φ_n の係数を比較して，$c_n\sqrt{n}=\lambda c_{n-1}$　　$\therefore\ c_n=\dfrac{\lambda^n}{\sqrt{n!}}c_0$

$$\therefore\quad \varphi_\lambda(\xi)=c_0\sum_{n=0}^{\infty}\frac{\lambda^n}{\sqrt{n!}}\varphi_n(\xi) \qquad ⓓ$$

つぎに，正しく規格化されるように係数を決めておこう．

$$1=\int|\varphi_\lambda(\xi)|^2d\xi=|c_0|^2\int\sum_{m=0}\sum_{n=0}\frac{(\lambda^*)^m}{\sqrt{m!}}\varphi_m^*(\xi)\frac{\lambda^n}{\sqrt{n!}}\varphi_n(\xi)d\xi$$

$$=|c_0|^2\sum_{m=0}\sum_{n=0}\frac{(\lambda^*)^m}{\sqrt{m!}}\frac{\lambda^n}{\sqrt{n!}}\delta_{m,n}$$

$$=|c_0|^2\sum_n\frac{|\lambda|^{2n}}{n!}=|c_0|^2\exp(|\lambda|^2)$$

より，$|c_0|=\exp\left(-\dfrac{|\lambda|^2}{2}\right)$.

$$\therefore\quad \varphi_\lambda(\xi)=\exp\left(-\frac{|\lambda|^2}{2}\right)\sum_{n=0}^{\infty}\frac{\lambda^n}{\sqrt{n!}}\varphi_n(\xi)$$

$$\therefore\quad c_n(\lambda)=\exp\left(-\frac{|\lambda|^2}{2}\right)\frac{\lambda^n}{\sqrt{n!}} \tag{e}$$

(2) この量子状態におけるエネルギーの期待値は,

$$\begin{aligned}\langle E\rangle&=\int\varphi_\lambda{}^*\hat{H}\varphi_\lambda d\xi\\&=|c_0|^2\sum_{m=0}^{\infty}\sum_{n=0}^{\infty}\frac{(\lambda^*)^m\lambda^n}{\sqrt{m!}\sqrt{n!}}\int\varphi_m{}^*(\xi)\hat{H}\varphi_n(\xi)d\xi\\&=|c_0|^2\sum_{n=0}^{\infty}\frac{|\lambda|^{2n}}{n!}\left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega\\&=\sum_{n=0}^{\infty}\exp(-|\lambda|^2)\frac{|\lambda|^{2n}}{n!}\left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega\\&=\left(|\lambda|^2+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega\end{aligned} \tag{f}$$

[4] (1) [3]の状態 φ_λ における位置と運動量の期待値，および，そのひろがりを求めよ．

(2) 時刻 $t=0$ でこの状態にあったとき，どのような時間発展をするか．

[解] (1) [3](1)の解のⓐを用いて,

$$\hat{a}\varphi_\lambda=\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\xi+\frac{\partial}{\partial\xi}\right)\varphi_\lambda=\lambda\varphi_\lambda \tag{a$'$}$$

を解くと,

$$\varphi_\lambda\propto\exp\left(-\frac{1}{2}(\xi-\sqrt{2}\lambda)^2\right)$$

$\lambda=\lambda_R+i\lambda_I$ $(\lambda_R,\lambda_I\in\boldsymbol{R})$ を代入して,

$$\varphi_\lambda=N\exp\left(-\frac{1}{2}(\xi-\sqrt{2}\lambda_R)^2\right)\exp\left(i\sqrt{2}\lambda_I\xi\right) \tag{b}$$

を得る．ゆえに，$|\varphi_\lambda|^2=|N|^2\exp\left(-(\xi-\sqrt{2}\lambda_R)^2\right)$

$$=|N|^2\exp\left(-\frac{m\omega}{\hbar}\left(x-\sqrt{\frac{2\hbar}{m\omega}}\lambda_R\right)^2\right)$$

となり，位置についての平均値 $\langle x\rangle=\sqrt{\frac{2\hbar}{m\omega}}\lambda_R$，分散 $\langle(\hat{x}-\langle x\rangle)^2\rangle=\frac{\hbar}{2m\omega}$ の Gauss 分布である．

φ_λ を x の関数とみなして，Fourier 変換したものを $\tilde{\varphi}_\lambda(p)$ とすると,

$$\tilde{\varphi}_\lambda(p)=\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int_{-\infty}^{\infty}dx\exp\left(-\frac{i}{\hbar}px\right)\varphi_\lambda(x)$$

$$=N'\exp\left(-\frac{1}{2}\frac{1}{m\omega\hbar}(p-\sqrt{2m\omega\hbar}\lambda_I)^2-i\sqrt{\frac{2}{m\omega\hbar}}\lambda_R p\right) \qquad ⓒ$$

となるから，$|\tilde{\varphi}_\lambda(p)|^2=|N'|^2\exp\left(-\frac{1}{m\omega\hbar}(p-\sqrt{2m\omega\hbar}\lambda_I)^2\right)$ が得られ，p については，平均値 $\langle p\rangle=\sqrt{2m\omega\hbar}\lambda_I$，分散 $\langle(\hat{p}-\langle p\rangle)^2\rangle=\frac{1}{2}m\omega\hbar$ の Gauss 分布となる．とくに，

$$\begin{aligned}\lambda&=\lambda_R+i\lambda_I\\&=\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\langle x\rangle+i\sqrt{\frac{1}{m\omega\hbar}}\langle p\rangle\right)\end{aligned} \qquad ⓓ$$

であるが，これは，$\hat{a}\varphi_\lambda=\lambda\varphi_\lambda$ の両辺に $\varphi_\lambda{}^*$ をかけて，x で積分すると，

$$\int\varphi_\lambda{}^*\hat{a}\varphi_\lambda dx=\lambda\int\varphi_\lambda{}^*\varphi_\lambda dx=\lambda$$

となることから当然である．

(2) [3](1)において，$\varphi_n(\xi)$ は n 番目のエネルギー固有値に属するから，$t=0$ で，$\varphi_\lambda(\xi)=\sum_{n=0}^{\infty}c_n(\lambda)\varphi_n(\xi)$ であるような状態は，

$$\varphi_\lambda(\xi,t)=\sum_{n=0}^{\infty}c_n(\lambda)\exp\left(-i\omega\left(n+\frac{1}{2}\right)t\right)\varphi_n(\xi)$$

のように時間発展する．ここで，$c_n(\lambda)=c_0\frac{\lambda^n}{\sqrt{n!}}$ を代入すると，

$$\varphi_\lambda(\xi,t)=c_0\sum_{n=0}^{\infty}\exp\left(-i\frac{1}{2}\omega t\right)\frac{(\lambda e^{-i\omega t})^n}{\sqrt{n!}}\varphi_n(\xi)$$

と書ける．ところが，これは定数倍を除いて，$\varphi_\lambda(\xi)$ において λ を $\lambda e^{-i\omega t}$ でおきかえたものと一致している．ところで，λ はⓓで述べたような意味があったから，これは，$\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\langle x\rangle+i\sqrt{\frac{1}{m\hbar\omega}}\langle p\rangle\right)$ が時間発展に際して $e^{-i\omega t}$ をかけるという形で変化することを意味している．これは調和振動子の古典的な運動にほかならない．この場合，任意の時刻 t に対して，$\hat{a}$ の固有状態でありつづけ，波束のひろがりは，

$$\langle(\hat{x}-\langle x\rangle)^2\rangle=\frac{\hbar}{2m\omega}, \qquad \langle(\hat{p}-\langle p\rangle)^2\rangle=\frac{m\omega\hbar}{2}$$

で，時間 t にかかわらず一定であることに注意しよう．

[5] ポテンシャル $V(x)$ のなかを運動する質量 m の粒子の Schrödinger 方程式は，運動量表示では，1次元の場合，つぎの方程式

$$i\hbar\frac{\partial\tilde{\psi}(p,t)}{\partial t}=\frac{p^2}{2m}\tilde{\psi}(p,t)+\int U(p-p')\tilde{\psi}(p',t)dp' \qquad ①$$

となることを示し，$U(p-p')$ の形を求めよ．

[解]　x-空間での Schrödinger 方程式は，

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(x,t)=-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi(x,t)+V(x)\psi(x,t) \tag{ⓐ}$$

この両辺に $\dfrac{1}{(2\pi\hbar)^{\frac{1}{2}}}e^{-\frac{ipx}{\hbar}}$ をかけて x で積分すると，

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\tilde{\psi}(p,t)=\frac{p^2}{2m}\tilde{\psi}(p,t)+\int U(p-p')\tilde{\psi}(p',t)dp' \tag{ⓑ}$$

を得る．ここで，

$$\tilde{\psi}(p,t)=\frac{1}{(2\pi\hbar)^{\frac{1}{2}}}\int\psi(x,t)e^{-\frac{ipx}{\hbar}}dx$$

ⓑの最後の項を得るために，

$$\begin{aligned}
&\int V(x)\psi(x,t)e^{-\frac{ipx}{\hbar}}dx\\
&=\iint\delta(x-y)V(x)\psi(y,t)e^{-\frac{ipx}{\hbar}}dx\,dy\\
&=\frac{1}{2\pi\hbar}\iiint e^{\frac{ip'(x-y)}{\hbar}}V(x)\psi(y,t)e^{-\frac{ipx}{\hbar}}dx\,dy\,dp'\\
&=\frac{1}{2\pi\hbar}\int\left(\int e^{-\frac{i(p-p')x}{\hbar}}V(x)dx\right)\left(\int\psi(y,t)e^{-\frac{ip'y}{\hbar}}dy\right)dp'
\end{aligned}$$

$$\therefore\quad U(p-p')\equiv\frac{1}{2\pi\hbar}\int e^{-\frac{i(p-p')x}{\hbar}}V(x)dx \tag{ⓒ}$$

[6]　調和振動子の Schrödinger 方程式を運動量空間で表すと，どのようになるか．

[解]　x-空間での調和振動子の Schrödinger 方程式は，

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(x,t)=-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi(x,t)+\frac{m\omega^2x^2}{2}\psi(x,t) \tag{ⓐ}$$

[5]のⓒに $V(x)=\dfrac{m\omega^2x^2}{2}$ を代入すると，

$$U(p-p')=-\frac{m\omega^2\hbar^2}{2}\frac{\partial^2}{\partial p^2}\delta(p-p')=-\frac{m\omega^2\hbar^2}{2}\frac{\partial^2}{\partial p'^2}\delta(p-p')$$

$$\therefore\quad i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\tilde{\psi}(p,t)=\frac{p^2}{2m}\tilde{\psi}(p,t)-\frac{m\omega^2\hbar^2}{2}\int\frac{\partial}{\partial p'^2}\delta(p-p')\tilde{\psi}(p',t)dp'$$

右辺第2項を2回部分積分し，$\tilde{\psi}(p',t)|_{p'=\pm\infty}=0$ を使うと，

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\tilde{\psi}(p,t)=\frac{p^2}{2m}\tilde{\psi}(p,t)-\frac{m\omega^2\hbar^2}{2}\frac{\partial^2}{\partial p^2}\tilde{\psi}(p,t) \tag{ⓑ}$$

これが，求める p-表示での Schrödinger 方程式である．

別解 はじめから，p-表示の波動関数 $\tilde{\varphi}(p)$ に交換関係を作用させると，

$$[\hat{x}, \hat{p}]\tilde{\varphi}(p) = i\hbar\tilde{\varphi}(p) \quad \text{ⓒ}$$

ここで，

$$\hat{p} = p, \qquad \hat{x} = i\hbar\frac{\partial}{\partial p} \quad \text{ⓓ}$$

のおきかえをすれば，明らかにⓒはみたされていることがわかる．そこで，$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2}\hat{x}^2$ に，ⓓのおきかえを代入すると，

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\tilde{\psi}(p, t) = \frac{p^2}{2m}\tilde{\psi}(p, t) - \frac{m\omega^2\hbar^2}{2}\frac{\partial^2}{\partial p^2}\tilde{\psi}(p, t)$$

が得られ，ⓑに一致していることが確かめられた．これは，x-表示での Schrödinger 方程式と同型であり，解はエルミート多項式を用いて求められる．

［7］ ［5］の結果を用いて，つぎの場合の波動関数を求めよ．

(1) $V(x) = cx$ のとき，エネルギーが E であるような定常状態．

(2) 自由粒子の場合，すなわち，$V(x) = 0$ のとき，初期値として $t = 0$ で $\psi(x, 0) = \delta(x)$ をみたしているときの一般の時刻における波動関数．

解 (1) $U(p) = \frac{1}{2\pi\hbar}\int e^{-\frac{ipx}{\hbar}}cx\,dx = i\hbar c\delta'(p)$ であるから，$E\tilde{\varphi} = \frac{p^2}{2m}\tilde{\varphi} + ci\hbar\frac{\partial}{\partial p}\tilde{\varphi}$ を解けばよい．

これから，

$$\tilde{\varphi}(p) = N\exp\left(\frac{1}{ci\hbar}\left(Ep - \frac{p^3}{6m}\right)\right) \quad \text{ⓐ}$$

が得られる．これから，

$$\begin{aligned}\tilde{\varphi}(x) &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^{\frac{1}{2}}}\int\tilde{\varphi}(p)\exp\left(i\frac{px}{\hbar}\right)dp \\ &= N'\int\exp\left[\frac{i}{\hbar}\left\{p\left(x - \frac{E}{c}\right) + \frac{p^3}{6mc}\right\}\right]dp \quad \text{ⓑ}\end{aligned}$$

がわかる．

(2) ［5］の解 ⓑより，p 表示での Schrödinger 方程式は，

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\tilde{\psi}(p, t) = \frac{p^2}{2m}\tilde{\psi}(p, t) \quad \text{ⓒ}$$

初期条件は，$\psi(x, 0) = \delta(x)$ であるから，

$$\tilde{\psi}(p, 0) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{\frac{1}{2}}} \quad \text{ⓓ}$$

ⓒ，ⓓを解いて，

$$\tilde{\psi}(p,\, t)=\frac{1}{(2\pi\hbar)^{\frac{1}{2}}}\exp\left(-i\frac{p^2}{2m\hbar}t\right)$$

$$\therefore\quad \psi(x,\, t)=\frac{1}{2\pi\hbar}\int\exp\left(-i\frac{p^2}{2m\hbar}t\right)\exp\left(i\frac{px}{\hbar}\right)dp$$

$$=e^{-\frac{\pi}{4}i}\sqrt{\frac{m}{2\pi\hbar}}\frac{1}{\sqrt{t}}\exp\left(i\frac{m}{2\hbar}\frac{x^2}{t}\right)$$

を得る.

第 5 章　中心力場のSchrödinger方程式

いよいよ本章では，もっと現実的な 3 次元の問題を議論していこう．まず，Schrödinger 方程式をつくる一般的規則であるが，ハミルトニアン $\hat{H}$ は古典的なハミルトニアン H_{cl} から対応規則のおきかえによってつくられる．しかし，$\hat{H}$ は一意的には決まらないのが普通である．一般の教科書では，あまり議論されていないが，どのようにすれば不定性が取り除けるかを，いくつかの例題，問題などを通してくわしく説明する(5.1，5.2 節)．

Schrödinger 方程式を解くという問題は，一般に系の次元の数がふえれば，ぐっと難しくなるが，力が中心力の場合には簡単化が行われる．

すなわち，角変数を分離したのち(5.3 節)，動径変数だけに関する Schrödinger 方程式を解くことになり，1 次元の問題に帰着されるので見通しがよい(5.4 節)．中心力場の問題の重要な具体例として，球対称な井戸型ポテンシャルによる束縛状態(5.6 節)と水素原子の問題(5.8 節)をとりあげる．これらも，解析的に解ける Schrödinger 方程式の数少ない例である．

5.1　Schrödinger 方程式をつくる一般的規則

第2章では，古典粒子のハミルトニアン

$$H_{cl}=\frac{\boldsymbol{p}^2}{2m}+V(\boldsymbol{r})=E \tag{2.36}$$

から出発して，対応規則

$$E\to i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\quad,\quad \boldsymbol{p}\to -i\hbar\nabla \tag{2.32}$$

のおきかえをすることによって，Schrödinger 方程式

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(\boldsymbol{r},t)=\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta+V(\boldsymbol{r})\right)\psi(\boldsymbol{r},t) \tag{2.37}$$

が得られることをみた．ところで，$p_i\,(i=1,2,3)$ は座標 $x_i\,(i=1,2,3)$ の正準共役量であったから，上のおきかえ規則は，一般化して，運動量をそれに共役な座標による微分に $-i\hbar$ をかけたものにおきかえる規則であるといってもよいであろう．すなわち，古典的には，一般座標 $q_i\,(i=1,2,\cdots,f)$ とその正準共役量 $p_i\,(i=1,2,\cdots,f)$ を正準変数としてもち，ハミルトニアンが $H_{cl}(q_i,p_i)$ で与えられるような系を考えると，その系の Schrödinger 方程式は，

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(q_i,t)=\hat{H}\psi(q_i,t) \tag{5.1}$$

で与えられる．ここで，右辺に表れた微分演算子 $\hat{H}$ は，古典的なハミルトニアン $H_{cl}(q_i,p_i)$ から，対応規則

$$p_i\to -i\hbar\frac{\partial}{\partial q_i} \tag{5.2}$$

に従うおきかえによって得られるものである．$\hat{H}$ のこともハミルトニアンとよぶことにしよう．このようにしてつくられた Schrödinger 方程式(5.1)は明らかに，時間については1階であり，重ね合わせの原理をみたしている．また，確率解釈を一般化して，系の座標がそれぞれ q_i から $q_i+dq_i\,(i=1,2,\cdots,f)$ の間にある確率は，

$$|\psi(q_i,t)|^2dq_1dq_2\cdots dq_f \tag{5.3}$$

で与えられるとしよう．このような解釈がうまくいくためには，全確率が時間によらずに1，すなわち

$$\int|\psi(q_i,t)|^2dq_1\cdots dq_f=1 \tag{5.4}$$

でなければならない．簡単にわかるように，ハミルトニアン $\hat{H}$ がエルミートな演算子であれば，これは自動的にみたされている．

例題1　$\hat{H}$ がエルミートであるとき，波動関数 $\psi(q_i,t)$ が Schrödinger 方程式

(5.1) をみたすならば，全確率 $\int|\psi(q_i,t)|^2dq_1\cdots dq_f$ は時間 t によらず一定であることを示せ.

解 微分演算子 $\hat{H}$ がエルミートであるとは，任意の規格化可能な関数 $\psi_1(q_i)$, $\psi_2(q_i)$,すなわち $\int|\psi_1(q_i)|^2dq_1\cdots dq_f<\infty$, $\int|\psi_2(q_i)|^2dq_1\cdots dq_f<\infty$ をみたすような 2 つの関数に対して，

$$\int\psi_2^*(q_i)\hat{H}\psi_1(q_i)dq_1\cdots dq_f=\int(\hat{H}\psi_2(q_i))^*\psi_1(q_i)dq_1\cdots dq_f$$

が成り立つことである．ところで，全確率の時間微分は，

$$\begin{aligned}&\frac{d}{dt}\int|\psi(q_i,t)|^2dq_1\cdots dq_f\\&=\frac{d}{dt}\int\psi(q_i,t)^*\psi(q_i,t)dq_1\cdots dq_f\\&=\int\left(\frac{\partial}{\partial t}\psi(q_i,t)\right)^*\psi(q_i,t)dq_1\cdots dq_f+\int\psi(q_i,t)^*\frac{\partial}{\partial t}\psi(q_i,t)dq_1\cdots dq_f\\&=\int\left(\frac{1}{i\hbar}\hat{H}\psi\right)^*\psi dq_1\cdots dq_f+\int\psi^*\frac{1}{i\hbar}\hat{H}\psi dq_1\cdots dq_f\\&=\frac{i}{\hbar}\left\{\int(\hat{H}\psi)^*\psi dq_1\cdots dq_f-\int\psi^*(\hat{H}\psi)dq_1\cdots dq_f\right\}\end{aligned}$$

と書けるから，$\hat{H}$ がエルミートであればこれは 0 である． ∎

ハミルトニアン $\hat{H}$ の不定性

ハミルトニアン $\hat{H}$ は，古典論的なハミルトニアン H_{cl} から，対応規則(5.2) のおきかえによってつくられたものであるとした．しかしながら，このようにいっただけでは，$\hat{H}$ は一意的には決まらないのが普通である．

例題 2 1 自由度の古典論的なハミルトニアン $H_{cl}(p,q)=pq$ を考える．これをたとえば，

(i) $H_{cl}(p,q)=pq$

(ii) $H_{cl}(p,q)=qp$

(iii) $H_{cl}(p,q)=\frac{1}{2}(pq+qp)$

(iv) $H_{cl}(p,q)=\frac{1}{2}(pq+qp)+(pq-qp)^2q$

の 4 通りの古典的には等価であるが，見かけ上ちがった形に書いたとき，対応規則(5.2)のおきかえによって得られるハミルトニアン $\hat{H}$ をそれぞれの場合に書け．また，それらはエルミートであるか．

解　おきかえ $p\to -i\hbar\dfrac{\partial}{\partial q}$ を行うと，それぞれ

(i) $\hat{H}=-i\hbar\dfrac{\partial}{\partial q}q$

(ii) $\hat{H}=-i\hbar q\dfrac{\partial}{\partial q}$

(iii) $\hat{H}=-i\hbar\left(\dfrac{1}{2}\dfrac{\partial}{\partial q}q+\dfrac{1}{2}q\dfrac{\partial}{\partial q}\right)$

(iv) $\hat{H}=-i\hbar\left(\dfrac{1}{2}\dfrac{\partial}{\partial q}q+\dfrac{1}{2}q\dfrac{\partial}{\partial q}\right)-\hbar^2 q$

となる．(i)と(ii)の場合はエルミートではないが，(iii)と(iv)はエルミートである．■

この例題からわかるように，正準共役量 q_i と p_i は古典論的には可換であり，$q_ip_i-p_iq_i=0$ であるが，対応規則(5.2)によるおきかえを左辺にほどこすと，

$$q_ip_i-p_iq_i\to q_i(-i\hbar)\frac{\partial}{\partial q_i}-(-i\hbar)\frac{\partial}{\partial q_i}q_i=i\hbar \tag{5.5}$$

であり，0ではない．そのため，ハミルトニアン $\hat{H}$ は，はじめに $H_{\rm cl}$ をどのような形に書いておくかに依存してしまうのである．この事情は物理学的に考えると，むしろ当然のことであるといえる．それは，量子論的には，2つのハミルトニアン $\hat{H}_1$ と $\hat{H}_2$ が異なっていても，その差がオーダー $\hbar$ の量であれば，古典論的な極限では区別がつかないからである．すなわち，古典的なハミルトニアンが与えられても，対応する量子論は一意的に決まらないのである．しかしながら，実際の物理系に対しては，理論のもつべき対称性その他の議論を使うことによって，上のような不定性は除くことができる．

例題3　3次元空間内を動く自由粒子の古典的なハミルトニアンは，直交座標では $H_{\rm cl}=\dfrac{1}{2m}(p_x^2+p_y^2+p_z^2)$ であり，極座標では，$H_{\rm cl}=\dfrac{1}{2m}\left(p_r{}^2+\dfrac{1}{r^2}p_\theta{}^2+\dfrac{1}{r^2\sin^2\theta}p_\varphi{}^2\right)$ である．それぞれの場合に，単純に対応規則(5.2)に従うおきかえをして，ハミルトニアン $\hat{H}$ をつくり，その結果を比べよ．また，どちらの場合に，Schrödinger 方程式は，3次元空間内の並進・回転に対する対称性をみたすか．

解　(i) 直交座標の $H_{\rm cl}$ からはじめた場合

対応規則(5.2)は，

$$p_x\to -i\hbar\frac{\partial}{\partial x},\ p_y\to -i\hbar\frac{\partial}{\partial y},\ p_z\to -i\hbar\frac{\partial}{\partial z}$$

であり，ハミルトニアンは，

$$\hat{H}=-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)=-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta \qquad ⓐ$$

となる．この右辺のラプラシアンを極座標で表すと(付録B参照)，

$$\hat{H}=-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2}+\frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r}+\frac{1}{r^2}\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}+\frac{1}{r^2}\frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right) \qquad ⓑ$$

である．よってSchrödinger 方程式は，

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(r,\theta,\varphi,t)=\hat{H}\psi(r,\theta,\varphi,t)$$

であり，確率密度は，

$$|\psi(r,\theta,\varphi,t)|^2 r^2\sin\theta drd\theta d\varphi \qquad ⓒ$$

で与えられる．

(ii) 極座標の H_{cl} からはじめた場合

対応規則(5.2)は，

$$p_r\to -i\hbar\frac{\partial}{\partial r},\quad p_\theta\to -i\hbar\frac{\partial}{\partial\theta},\quad p_\varphi\to -i\hbar\frac{\partial}{\partial\varphi}$$

であるから，これを単純に適用すると，ハミルトニアンは，

$$\hat{H}'=-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2}+\frac{1}{r^2}\frac{\partial^2}{\partial\theta^2}+\frac{1}{r^2\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right) \qquad ⓓ$$

となる．Schrödinger 方程式は，

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi'(r,\theta,\varphi,t)=\hat{H}'\psi'(r,\theta,\varphi,t) \qquad ⓔ$$

であり，この場合の確率密度は，

$$|\psi'(r,\theta,\varphi,t)|^2 drd\theta d\varphi \qquad ⓕ$$

で与えられることになる．波動関数を，

$$\psi''(r,\theta,\varphi,t)=\frac{1}{r}(\sin\theta)^{-\frac{1}{2}}\psi'(r,\theta,\varphi,t)$$

のように再定義すると，確率密度の表式ⓕは，直交座標からはじめた場合のⓒと同じ形になる．この ψ'' に対して，Schrödinger 方程式ⓓ，ⓔを書きなおすと，

$$\begin{aligned}&i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi''(r,\theta,\varphi,t)=\hat{H}''\psi''(r,\theta,\varphi,t)\\&\hat{H}''=-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2}+\frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r}+\frac{1}{r^2}\frac{1}{\sqrt{\sin\theta}}\frac{\partial^2}{\partial\theta^2}\sqrt{\sin\theta}+\frac{1}{r^2\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right)\end{aligned} \qquad ⓖ$$

となり，明らかにⓑとは異なっている．

ところで，ⓐに表れたラプラシアンは，明らかに3次元空間の並進および回転に対して不変な演算子である．一方，2階の微分演算子でそのような不変性をもつもの

は，ラプラシアンだけであるから，ⓖはその不変性をこわしている．　■

この例題からもわかるように，ハミルトニアンの不定性は，理論のもつべき対称性を考えることにより，かなりの程度とり除くことができる．実際，場の量子論では，ゲージ不変性，ローレンツ不変性，ユニタリー性，およびくりこみ可能性から，一意的に量子論をつくることができる．原子・分子や固体物理などに現れるハミルトニアンが正しいものであることは，場の量子論の非相対論的極限を考えることによって，最終的に示すことができる．

5.2　極座標による3次元の Schrödinger 方程式

5.1節で，古典的なハミルトニアン H_{cl} が与えられたとき，どのようにして Schrödinger 方程式を書くことができるかという一般的な規則を議論した．その際，対応する量子論は一意的には決まらず，はじめに H_{cl} をどのような形に書いておくかに依存することを述べた．しかし，ハミルトニアンの不定性は，理論のもつべき対称性を考えることによりとり除くことができ，3次元空間内を動く自由粒子のハミルトニアンは，3次元空間の並進および回転に対して不変な演算子

$$\hat{H}=-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)=-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 \tag{5.6}$$

の形に一意的に決まることを述べた．

したがって，球対称な場 $V(\boldsymbol{r})=V(r)$ のなかを運動している粒子の定常状態の Schrödinger 方程式は，

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta+V(r)\right]\varphi(\boldsymbol{r})=E\varphi(\boldsymbol{r}) \tag{5.7}$$

で記述されると考えるのが自然である．この方程式を解くには，直交座標 x, y, z の代わりに極座標を用いたほうが便利である．極座標になおすときには，

$$\begin{aligned} x&=r\sin\theta\cos\varphi \\ y&=r\sin\theta\sin\varphi \\ z&=r\cos\theta \end{aligned} \tag{5.8}$$

という関係を用いて，この直交座標での ∇^2 から計算すればよい．これからたんねんに計算するか，曲線座標によるラプラシアンを使って計算すると(付録B参照)，

$$\begin{aligned} &\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\left\{\frac{1}{r}\frac{\partial^2}{\partial r^2}r+\frac{1}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right)+\frac{1}{r^2\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right\}\varphi(\boldsymbol{r})\right. \\ &\left.\quad+V(r)\varphi(\boldsymbol{r})\right]=E\varphi(\boldsymbol{r}) \end{aligned} \tag{5.9}$$

という極座標で表した Schrödinger 方程式が得られる．

結果の物理的意味をわかりやすくするために，運動エネルギー $\dfrac{p^2}{2m}$ を微分演算子 $\dfrac{\partial}{\partial r}, \dfrac{\partial}{\partial \theta}, \dfrac{\partial}{\partial \varphi}$ そのものの関数として表さず，物理的解釈がいっそう明瞭なエルミート演算子の関数として表してみよう．古典的なベクトル解析の恒等式

$$(\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{B})^2 = A^2B^2 - (\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{B})^2 \tag{5.10}$$

を利用して，$\boldsymbol{A}=\boldsymbol{r}, \boldsymbol{B}=\boldsymbol{p}$ とおくと，

$$L^2 = (\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{p})^2 = r^2p^2 - (\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{p})^2 \tag{5.11}$$

が得られる．ゆえに，

$$H_{\rm cl} = \frac{p^2}{2m} = \frac{p_r{}^2}{2m} + \frac{L^2}{2mr^2} \tag{5.12}$$

ただし，$p_r = \dfrac{1}{r}(\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{p})$. これを量子論にもっていく場合には，$\hat{H}$ のなかのすべての項をエルミート演算子で表さなければならない．$\hat{\boldsymbol{L}} = \dfrac{\hbar}{i}(\boldsymbol{r}\times\nabla)$ で定義して $r^{-2}\hat{L}^2$ のエルミート性を調べよう．r^{-2} をかけるかわりに $\hat{r}^{-2}$ を使うと，

$$(\hat{r}^{-2}\hat{L}^2)^\dagger = (\hat{L}^2)^\dagger(\hat{r}^{-2})^\dagger = \hat{L}^2\hat{r}^{-2} = \hat{r}^{-2}\hat{L}^2 \tag{5.13}$$

最後の等号のところは，$\hat{L}^2$ が等方的な関数 r^{-2} とは交換することを利用した．$\dfrac{1}{r}(\hat{\boldsymbol{r}}\cdot\hat{\boldsymbol{p}})$ は，それじしんではエルミートではないが $\hat{p}_r = \dfrac{\hbar}{i}\dfrac{1}{r}\dfrac{\partial}{\partial r}r$ はエルミートで，しかも $[r, \hat{p}_r] = i\hbar$ をみたす．

例題 (1) $\hat{p}_r = \dfrac{\hbar}{i}\dfrac{1}{r}\dfrac{\partial}{\partial r}r$ がエルミートであることを示せ．

(2) $[r, \hat{p}_r] = i\hbar$ を示せ．

解 (1) 極座標では，2つの波動関数 $\psi(r, \theta, \varphi)$ と $\varphi(r, \theta, \varphi)$ の内積は，

$$(\psi, \varphi) = \int \psi^*(r, \theta, \varphi)\varphi(r, \theta, \varphi)r^2\sin\theta drd\theta d\varphi$$

と表される．

$$\begin{aligned}(\psi, \hat{p}_r\varphi) &= \int \psi^*(r, \theta, \varphi)\left(\frac{\hbar}{i}\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}r\varphi(r, \theta, \varphi)\right)r^2\sin\theta drd\theta d\varphi \\ &= \int\left(\frac{\hbar}{i}\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}r\psi\right)^*\varphi r^2\sin\theta drd\theta d\varphi \\ &= (\hat{p}_r\psi, \varphi)\end{aligned}$$

(2) $[r, \hat{p}_r] = \left[r, \dfrac{\hbar}{i}\left(\dfrac{\partial}{\partial r} + \dfrac{1}{r}\right)\right] = \left[r, \ \dfrac{\hbar}{i}\dfrac{\partial}{\partial r}\right] = i\hbar$ ∎

したがって，

$$\hat{H}=\frac{\hat{p}_r{}^2}{2m}+\frac{\hat{\boldsymbol{L}}^2}{2mr^2}+V(r) \tag{5.14}$$

が，極座標でエルミート演算子のみで表されたハミルトニアンである．これが正しい Schrödinger 方程式と同等であることは，直接，計算によって示すことができる．古典力学では $\boldsymbol{L}=\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{p}$ だから，量子力学でもつぎのようにとることにしよう．

$$\begin{aligned}
\hat{L}_x&=\hat{y}\hat{p}_z-\hat{z}\hat{p}_y=\frac{\hbar}{i}\left(y\frac{\partial}{\partial z}-z\frac{\partial}{\partial y}\right)\\
\hat{L}_y&=\hat{z}\hat{p}_x-\hat{x}\hat{p}_z=\frac{\hbar}{i}\left(z\frac{\partial}{\partial x}-x\frac{\partial}{\partial z}\right)\\
\hat{L}_z&=\hat{x}\hat{p}_y-\hat{y}\hat{p}_x=\frac{\hbar}{i}\left(x\frac{\partial}{\partial y}-y\frac{\partial}{\partial x}\right)
\end{aligned} \tag{5.15}$$

(5.15) は (5.8) を使って球座標に変換することができて，

$$\begin{aligned}
\hat{L}_x&=-\frac{\hbar}{i}\left(\sin\varphi\frac{\partial}{\partial\theta}+\cot\theta\cos\varphi\frac{\partial}{\partial\varphi}\right)\\
\hat{L}_y&=\frac{\hbar}{i}\left(\cos\varphi\frac{\partial}{\partial\theta}-\cot\theta\sin\varphi\frac{\partial}{\partial\varphi}\right)\\
\hat{L}_z&=\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial\varphi}
\end{aligned} \tag{5.16}$$

となる．さらに (5.16) から $(\hat{L})^2=(\hat{L}_x)^2+(\hat{L}_y)^2+(\hat{L}_z)^2$ を求めると，

$$\hat{L}^2=-\hbar^2\left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right)+\frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right] \tag{5.17}$$

を得る．

$\hat{p}_r=\frac{\hbar}{i}\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}r$ を２乗すると，

$$\hat{p}_r{}^2=-\hbar^2\frac{1}{r}\frac{\partial^2}{\partial r^2}r \tag{5.18}$$

であるから，この２つの式よりただちに，

$$\frac{\hat{p}_r{}^2}{2m}+\frac{\hat{L}^2}{2mr^2}=-\frac{\hbar^2\Delta}{2m} \tag{5.19}$$

という正しい表式になっていることが確かめられる．ゆえに，(5.14) が極座標でエルミート演算子のみで表された正しいハミルトニアンであることがわかる．

［問題 1］　一般座標 $\hat{q}_i\,(i=1,2,\cdots,n)$ とそれに共役な運動量 $\hat{p}_i$ の間に，$[\hat{q}_i,\hat{p}_i]=i\hbar$ という交換関係があり，関数 $\psi(q)$ と $\varphi(q)$ の内積は，ある正の実関数 $f(q)$ を用いて，

$$(\psi,\varphi)\equiv\int f(q)\psi^*(q)\varphi(q)d^nq \tag{①}$$

で与えられるものとする．このとき，

$$p_i = \frac{\hbar}{i}\left(\frac{\partial}{\partial q_i} + F_i(q)\right) \qquad ②$$

がエルミート演算子になるような実数値関数 $F_i(q)$ を求めよ．

[解] $[q_i, F_i(q)] = 0$ だから，交換関数をみたす範囲で②のおきかえをする(ただし，$F_i(q)$ は実数とする)．p_i がエルミートであるためには，任意の ψ, φ について，

$$\int f(q)(p_i\psi)^*\varphi d^nq = \int f(q)\psi^* p_i\varphi d^nq \qquad ⓐ$$

が成り立たなければならない．②をⓐに代入すると，

$$\int f(q)\left\{\frac{\hbar}{i}\left(\frac{\partial}{\partial q_i} + F_i(q)\right)\psi\right\}^*\varphi d^nq = \int f(q)\psi^*\left\{\frac{\hbar}{i}\left(\frac{\partial}{\partial q_i} + F_i(q)\right)\right\}\varphi d^nq \qquad ⓑ$$

ゆえに，

$$(\text{左辺}) = -\frac{\hbar}{i}\left[\int f(q)\left(\frac{\partial\psi^*}{\partial q_i}\right)\varphi d^nq + \int f(q)F_i(q)\psi^*\varphi d^nq\right] \qquad ⓒ$$

$$(\text{右辺}) = \frac{\hbar}{i}\left[\int f(q)\psi^*\frac{\partial\varphi}{\partial q_i}d^nq + \int f(q)\psi^* F_i(q)\varphi d^nq\right] \qquad ⓓ$$

ⓓの部分積分を行いⓒと比較すると，

$$F_i(q) = \frac{1}{2f}\frac{\partial f}{\partial q_i} \qquad ⓔ$$

が得られる． ▮

[問題 2] 前問の応用として，3次元極座標で r, θ, φ に共役な運動量演算子を求めてみよう．

(1) r に対する運動量 p_r がエルミートであるためには，

$$p_r = \frac{\hbar}{i}\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}r = \frac{\hbar}{i}\left(\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r}\right)$$

とすればよいことを示せ．

(2) θ に対する運動量演算子は，

$$p_\theta = \frac{\hbar}{i}\left(\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{1}{2}\cot\theta\right) = \frac{\hbar}{i}\frac{1}{\sqrt{\sin\theta}}\frac{\partial}{\partial\theta}\sqrt{\sin\theta}$$

とすればよいことを示せ．

(3) φ に対応する運動量は，関数が周期 2π の周期関数であれば，

$$p_\varphi = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial\varphi}$$

としてよいことを示せ．

［解］　［問題1］より，

$$\hat{p}_i=\frac{\hbar}{i}\left(\frac{\partial}{\partial q_i}+\frac{1}{2f}\frac{\partial f}{\partial q_i}\right) \qquad ⓐ$$

(1) $f=r^2\sin\theta$，$q_i=r$ をⓐに代入すると，

$$\hat{p}_r=\frac{\hbar}{i}\left(\frac{\partial}{\partial r}+\frac{1}{r}\right)=\frac{\hbar}{i}\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}r$$

(2) $q_i=\theta$ をⓐに代入すると，

$$\hat{p}_\theta=\frac{\hbar}{i}\left(\frac{\partial}{\partial\theta}+\frac{1}{2}\cot\theta\right)=\frac{\hbar}{i}\frac{1}{\sqrt{\sin\theta}}\frac{\partial}{\partial\theta}\sqrt{\sin\theta}$$

(3) ［問題1］の解において ψ，φ が周期 2π の周期関数なら表面項は消える．

$$\therefore\quad \hat{p}_\varphi=\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial\varphi} \qquad ▮$$

［問題3］　球対称なポテンシャル $V(r)$ の場合の古典的なハミルトニアンは，

$$H_{\rm cl}=\frac{1}{2m}\left(p_r{}^2+\frac{1}{r^2}p_\theta{}^2+\frac{1}{r^2\sin^2\theta}p_\varphi{}^2\right)+V(r) \qquad ①$$

で与えられる．これに前問で求めたエルミートな演算子 $\hat{p}_r, \hat{p}_\theta, \hat{p}_\varphi$ を代入したものと，ラプラシアンを直交座標から極座標になおすことによって得られるハミルトン演算子とを比較せよ．

［解］　［問題2］で得られた $\hat{p}_r, \hat{p}_\theta, \hat{p}_\varphi$ を用いると，

$$\hat{p}_r{}^2=-\hbar^2\frac{1}{r}\frac{\partial^2}{\partial r^2}r,\quad \hat{p}_\theta{}^2=-\hbar^2\frac{1}{\sqrt{\sin\theta}}\frac{\partial^2}{\partial\theta^2}\sqrt{\sin\theta},\quad \hat{p}_\varphi{}^2=-\hbar^2\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}$$

が得られる．したがって，

$$\hat{H}''=-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{1}{r}\frac{\partial^2}{\partial r^2}r+\frac{1}{r^2}\frac{1}{\sqrt{\sin\theta}}\frac{\partial^2}{\partial\theta^2}\sqrt{\sin\theta}+\frac{1}{r^2\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right)+V(r) \qquad ⓐ$$

が題意のハミルトニアン演算子である．これは，127ページの例題のⓖで与えられた $\hat{H}''$ と同じものであり，ラプラシアンを書きかえたものとは一致しない．したがって，前問でやったように，交換関係をみたす範囲で $\hat{p}_i$ の定義を修正して，エルミート演算子になおし，これを用いてSchrödinger方程式を書きくだしても，正しいSchrödinger方程式が得られるとは限らない．　▮

5.3　角変数の分離 — 球面調和関数

したがって，ポテンシャルが球対称のときのSchrödinger方程式として(5.9)を採用する．これは，一見，複雑にみえるが，この方程式は変数分離型である．これを r を含む部分と θ, φ を含む部分とに分けるために，

$$\varphi(\boldsymbol{r})=\varphi(r,\theta,\varphi)=R(r)Y(\theta,\varphi) \qquad (5.20)$$

とおいて(5.9)に代入し，$\dfrac{-2mr^2}{\hbar^2}$ をかけると，

$$r\frac{d^2}{dr^2}(rR)Y(\theta,\varphi)+\left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right)+\frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right]R(r)Y(\theta,\varphi)$$
$$+\frac{2mr^2}{\hbar^2}(E-V(r))R(r)Y(\theta,\varphi)=0 \tag{5.21}$$

を得る．両辺を $R(r)Y(\theta,\varphi)$ でわると，

$$\begin{aligned}&\frac{r}{R}\frac{d^2}{dr^2}(rR)+\frac{2mr^2}{\hbar^2}(E-V(r))\\&=-\frac{1}{Y}\left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial Y}{\partial\theta}\right)+\frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2 Y}{\partial\varphi^2}\right]\end{aligned} \tag{5.22}$$

となる．(5.22)の左辺は r のみの関数，右辺は θ と φ だけに関係しているので両辺ともある定数に等しくなければならない．この定数を λ とおくと，(5.22)から動径部分の方程式として，

$$\frac{1}{r}\frac{d^2}{dr^2}(rR)+\left\{\frac{2m}{\hbar^2}(E-V(r))-\frac{\lambda}{r^2}\right\}R=0 \tag{5.23}$$

を得る．角部分の方程式としては，

$$\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial Y}{\partial\theta}\right)+\frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2 Y}{\partial\varphi^2}+\lambda Y=0 \tag{5.24}$$

が得られる．角部分に関する方程式(5.24)は $V(r)$ の形にもエネルギー E にもまったく無関係である．したがって，どんな中心力ポテンシャルに対しても共通である．いま，

$$Y(\theta,\varphi)=\Theta(\theta)\Phi(\varphi)$$

を代入して，前と同じ手続きに従うと，

$$\sin\theta\frac{d}{d\theta}\left(\sin\theta\frac{d\Theta(\theta)}{d\theta}\right)\frac{1}{\Theta(\theta)}+\lambda\sin^2\theta=-\frac{1}{\Phi(\varphi)}\frac{d^2\Phi(\varphi)}{d\varphi^2} \tag{5.25}$$

が得られる．両辺ともある定数に等しくなければならないので，これを m^2 とおくと[1)]，さらに分離できて，

$$\frac{d^2\Phi(\varphi)}{d\varphi^2}+m^2\Phi(\varphi)=0 \tag{5.26}$$

$$\frac{1}{\sin\theta}\frac{d}{d\theta}\left(\sin\theta\frac{d\Theta(\theta)}{d\theta}\right)+\left(\lambda-\frac{m^2}{\sin^2\theta}\right)\Theta(\theta)=0 \tag{5.27}$$

となる．

(5.26)の解　固有関数が一価関数であるという要請をおくと，$\Phi(2\pi)=\Phi(0)$ なの

1) 粒子の質量と混同するおそれがなきにしもあらずであるが，物理的には明らかなので，慣例により，φ に付随する量子数には m という記号を用いることにする．

で，(5.26)の特解 $e^{im\varphi}$ は $e^{2\pi im}=1$ をみたさなければならない．したがって，

$$m=0,\ \pm1,\ \pm2,\ \cdots \tag{5.28}$$

のときにのみ，上の要請はみたされる．$\int_0^{2\pi}\Phi^*\Phi d\varphi=1$ と規格化して，

$$\Phi_m(\varphi)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{im\varphi} \qquad (m=0,\ \pm1,\ \pm2,\ \cdots) \tag{5.29}$$

が(5.26)の解となる．

(5.27)の解　θ のかわりに，$z=\cos\theta$ と変数を変換し，

$$\Theta(\theta)\equiv P^m(z) \tag{5.30}$$

とおくのが便利である．その結果，(5.27)の方程式は，

$$\frac{d}{dz}\left[(1-z^2)\frac{dP^m}{dz}\right]+\left[\lambda-\frac{m^2}{1-z^2}\right]P^m=0 \tag{5.31}$$

となる．θ の領域は 0 から π までなので，z の領域は 1 から -1 までとなる．この解は，Legendre の微分方程式

$$\frac{d}{dz}\left[(1-z^2)\frac{dP}{dz}\right]+\lambda P=0 \tag{5.32}$$

の解 P を用いて，

$$P^m=(1-z^2)^{\frac{|m|}{2}}\frac{d^{|m|}P}{dz^{|m|}} \tag{5.33}$$

と表される．(5.32)の解は，λ が特定の値をとらない限り，いずれも，$z=\pm1$ で無限大となり物理的に許されない．しかし，l を正の整数または 0 として $\lambda=l(l+1)$ となっていれば，この解のうちの 1 つは有限となる(付録A参照)．いわゆる l 次の Legendre の多項式

$$P_l(z)=\frac{1}{2^l l!}\frac{d^l}{dz^l}(z^2-1)^l, \qquad l=0,\ 1,\ 2,\ \cdots \tag{5.34}$$

が(5.32)の有限の解となる．したがって，(5.31)は $\lambda=l(l+1), |m|\leqq l$ ならば，物理的に許される解をもっており，Legendre の多項式 $P_l(z)$ を使って，$P^m(z)$ の有限な解は，

$$P_l^m(z)=(1-z^2)^{\frac{|m|}{2}}\frac{d^{|m|}P_l(z)}{dz^{|m|}} \tag{5.35}$$

に帰着する．この $P_l^m(z)$ を l 次の Legendre の陪関数とよぶ．

球面調和関数

(5.27)で $\lambda=l(l+1)$ としたときの解を球面調和関数とよび，規格化定数 N_{lm} と(5.29)，(5.35)を使って，

$$Y_l^m(\theta,\varphi)=N_{lm}P_l^m(\cos\theta)\Phi_m(\varphi) \tag{5.36}$$

のように書ける．計算は省略するが，規格化された球面調和関数は，

$$Y_l^m(\theta,\varphi)=\varepsilon\sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}\frac{(l-|m|)!}{(l+|m|)!}}P_l^m(\cos\theta)e^{im\varphi} \tag{5.37}$$

ただし，

$$\varepsilon=\begin{cases}(-1)^m & (m>0)\\ 1 & (m\leqq 0)\end{cases}$$

で与えられ，次の直交関係を満足する．

$$\int_0^{2\pi}d\varphi\int_0^{\pi}(Y_l^m)^*(\theta,\varphi)Y_{l'}^{m'}(\theta,\varphi)\sin\theta d\theta=\delta_{ll'}\delta_{mm'} \tag{5.38}$$

$l\leqq 2$ のときの Y_l^m の具体的な式をあげておく．

$$\begin{aligned}
&Y_0^0=\frac{1}{\sqrt{4\pi}}\\
&Y_1^0=\sqrt{\frac{3}{4\pi}}\cos\theta,\quad Y_1^{\pm1}=\mp\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\sin\theta e^{\pm i\varphi}\\
&Y_2^0=\sqrt{\frac{5}{4\pi}}\left(\frac{3}{2}\cos^2\theta-\frac{1}{2}\right),\quad Y_2^{\pm1}=\mp\sqrt{\frac{15}{8\pi}}\sin\theta\cos\theta e^{\pm i\varphi}\\
&Y_2^{\pm2}=\sqrt{\frac{15}{32\pi}}\sin^2\theta e^{\pm 2i\varphi}
\end{aligned} \tag{5.39}$$

角運動量状態

つぎに，波動関数の θ，φ への依存性を表す球面調和関数は，角運動量状態を与えると完全に決まることを説明しておこう．

さきほど，導出した(5.17)と(5.24)とを比べると，

$$\hat{L}^2Y_l^m(\theta,\varphi)=l(l+1)\hbar^2Y_l^m(\theta,\varphi) \tag{5.40}$$

同様にして，(5.16)，(5.29)より，

$$\hat{L}_zY_l^m(\theta,\varphi)=m\hbar\ Y_l^m(\theta,\varphi) \tag{5.41}$$

が得られる．すなわち，

球関数 $Y_l^m(\theta,\varphi)$ は，固有値 $l(l+1)\hbar^2$ をもつ角運動量の 2 乗の固有関数であり，同時に固有値 $m\hbar$ をもつ角運動量の z 成分の固有関数でもある．

(5.40)に出てくる量子数 l を軌道角運動量量子数とよび，(5.41)に出てくる量子数 m を軌道磁気量子数という．(5.19)を使うと，極座標の Schrödinger 方程式(5.9)は，

$$\left[\frac{\hat{p}_r{}^2}{2m}+\frac{\hat{L}^2}{2mr^2}+V(r)\right]\varphi=E\varphi \tag{5.42}$$

と書くことができる．これは極座標によるハミルトニアン $\hat{H}$ が，

$$\hat{H}=\frac{\hat{p}_r{}^2}{2m}+\frac{\hat{L}^2}{2mr^2}+V(r) \tag{5.43}$$

であることを意味する．(5.43)，(5.17)，(5.16)より，

$$[\hat{H},\hat{L}^2]=[\hat{H},\hat{L}_z]=[\hat{L}^2,\hat{L}_z]=0$$

であることが容易にわかる．したがって，ハミルトニアン(5.43)で記述される系は，エネルギーと角運動量の2乗と角運動量のz成分の値がはっきり決まっている定常状態をもつことができる．この状態の波動関数は，上にあげた3つの演算子$\hat{H}$, $\hat{L}^2$, $\hat{L}_z$すべての同時固有状態である．

5.4　動径方程式

前節の議論より，任意の球対称なポテンシャルのなかで，L^2，L_zがきまった値をもつ粒子の定常状態の波動関数は，

$$\varphi(\boldsymbol{r})=R_l(r)\,Y_l{}^m(\theta,\varphi) \tag{5.44}$$

という形に書きくだすことができた．$Y_l{}^m(\theta,\varphi)$がL^2の固有関数であるから，(5.23)から$R_l(r)$は，

$$\frac{1}{r}\frac{d^2}{dr^2}(rR_l)+\left\{\frac{2m}{\hbar^2}(E-V(r))-\frac{l(l+1)}{r^2}\right\}R_l=0 \tag{5.45}$$

の解である．この方程式は量子数mの値をまったく含んでいない．それは，球対称性をもつ場では，空間に他と区別されるような方向はないからである．いま，

$$R_l(r)=\frac{\chi_l(r)}{r} \tag{5.46}$$

とおいて(5.45)に代入すると，$\chi_l(r)$に対する方程式は，

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\chi_l(r)}{dr^2}+\left[V(r)+\frac{l(l+1)\hbar^2}{2mr^2}\right]\chi_l(r)=E\chi_l(r) \tag{5.47}$$

という1次元のSchrödinger方程式によく似た式に書きかえられる．この方程式(5.47)は，

> ポテンシャルエネルギー
>
> $$V_{\text{eff}}(r)=V(r)+\frac{l(l+1)\hbar^2}{2mr^2}$$
>
> の場のなかの$\infty>r\geq 0$の領域での1次元運動に対するSchrödinger方程式と同じ形である．

右辺第2項に加えられたポテンシャルエネルギーは遠心力ポテンシャル(あるいは遠心力障壁)とよばれ，このポテンシャルエネルギーによる力は，角運動量の大きさが$\sqrt{l(l+1)}\hbar$のときの遠心力に等しく，$l>0$の粒子が原点に近づくのを妨げる働

きをする．この1次元的性格を使って，(5.47)の解の一般的性質を考えてみよう．

1. 第3章3.1節で証明した性質「1次元問題では，離散スペクトルの表れるエネルギー準位は縮退していない」は，そのまま成り立つ．したがって，エネルギーの値を与えると，方程式(5.47)の解，すなわち，波動関数の動径部分は完全に決まるといってよい．波動関数の角部分は l と m の値によって，完全に決まることを考えると，球対称な場のなかの運動での波動関数は E, l, m の値によって完全に決定できることになる．ただし，E と l を指定しても，(5.45)は量子数 m の値をまったく含んでいないので，$(2l+1)$ 個の m の値に対応してエネルギーは $(2l+1)$ 重に縮退している．

2. 波動関数が規格化できるためには，

$$\begin{aligned}\int_0^\infty d^3r\,|\varphi(\boldsymbol{r})|^2 &= \int_0^\infty r^2dr\int d\Omega\,|R_l(r)Y_l^m(\theta,\varphi)|^2 \\ &= \int_0^\infty r^2dr\,|R_l(r)|^2 \\ &= \int_0^\infty dr\,|\chi_l(r)|^2 = 1 \end{aligned} \tag{5.48}$$

したがって，$\chi_l(r)$ に対する規格化条件も1次元的性格をもっている．

3. $\chi_l(r)$ の原点におけるふるまいを調べ，$\varphi(\boldsymbol{r})$ がほんとうに原点を含む全空間において Schrödinger 方程式(5.9)の解になっているかどうか確かめる必要がある．

そこで，原点近傍での動径関数のふるまいを調べてみよう．いま，ポテンシャルエネルギー $V(r)$ は，

$$\lim_{r\to 0} V(r)r^2 = 0 \tag{5.49}$$

と仮定する．まず，$l\neq 0$ の場合を調べよう．r が十分小さいときには，遠心力障壁は $V(r)-E$ に比べて，はるかに大きい．そこで(5.47)は，

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\chi_l(r)}{dr^2}+\frac{\hbar^2}{2m}\frac{l(l+1)}{r^2}\chi_l(r)\simeq 0$$

となる．この式に $\chi_l(r)\simeq r^s$ を代入すると，$s(s-1)=l(l+1)$ となるので，$s=l+1$ または $s=-l$ となる．ゆえに，

$$\chi_l(r)\simeq r^{l+1},\quad \text{または}\quad r^{-l} \tag{5.50}$$

となる．r^{-l} とふるまう解は原点で発散し，規格化条件(5.48)を満足していない．したがって物理的な解にはなり得ない．r^{l+1} とふるまう解のみが物理的に許され，

$$\chi_l(0)=0\quad (l\neq 0\ \text{のとき}) \tag{5.51}$$

となる.

では $l=0$ の場合にはどうなるであろうか.

例題　$l=0$ のときにも, $\chi_l(0)=0$ であることを証明せよ.

解　題意に反して, $\chi_0(0)=c\neq0$ と仮定してみよう. (5.44) に代入すると, $\varphi(\boldsymbol{r})$ は原点において $1/r$ のようにふるまい,

$$\varphi(\boldsymbol{r})=\frac{c}{r}Y_0{}^0(\theta,\varphi)=\frac{c}{\sqrt{4\pi}}\frac{1}{r} \qquad \text{ⓐ}$$

となる. それゆえ,

$$\Delta\varphi(\boldsymbol{r})=\frac{c}{\sqrt{4\pi}}[-4\pi\delta(\boldsymbol{r})]=-\sqrt{4\pi}\,c\delta(\boldsymbol{r})$$

を用いると,

$$\begin{aligned}\hat{H}\varphi(\boldsymbol{r})&=\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta+V(r)\right]\varphi(\boldsymbol{r})\\&=\frac{\hbar^2}{2m}\sqrt{4\pi}\,c\delta(\boldsymbol{r})+V(r)\varphi(\boldsymbol{r})\end{aligned} \qquad \text{ⓑ}$$

となる. ところが, Schrödinger 方程式は, $\hat{H}\varphi(\boldsymbol{r})=E\varphi(\boldsymbol{r})$ と $\varphi(\boldsymbol{r})$ に関して斉次なので, $\chi_0(0)=c\neq0$ である限り原点において Schrödinger 方程式をみたさない. ゆえに, $\chi_0(0)=c=0$ でなければならない. ∎

したがって, つぎのように結論することができる.

原点における条件, $\chi_l(r=0)=0$ $(l=0,1,2,\cdots)$ を1次元の動径方程式(5.47)に課して解けば, 球対称な場のなかを運動している粒子の3次元の Schrödinger 方程式を解くことと同等になる.

1次元的性格とは別に, つぎのような性質もある.

4. ハミルトニアン(5.43)は, 2個の固有値 ±1 をもつ空間反転の演算子 $\hat{P}$ と交換する[1]. $\hat{P}$ の演算に対して r 座標は不変であるが, 角度変数は $\theta\to\pi-\theta$, $\varphi\to\varphi+\pi$ と変換される. したがって, 偶数の l をもつ状態は偶パリティの状態に対応し, 奇数の l をもつ状態は, 奇パリティの状態に対応する.

[問題 4]　中心力ポテンシャル $V(r)$ のなかでの質量 m の粒子が, いくつかの束縛状態をもっているとする. この場合, 与えられた角運動量 l の値に対して許される最低エネルギー固有値 $E_l^{(0)}$ は, l の増大とともに大きくなることを証明せよ.

[解]　この問題は, 1次元の Schrödinger 方程式(5.47)の問題に帰着させて議

1)　パリティの演算子 $\hat{P}$ は, 波動関数 $\psi(\boldsymbol{r},t)$ につぎのように作用するものとして定義する. $\hat{P}\psi(\boldsymbol{r},t)=\psi(-\boldsymbol{r},t)$.

論できる．直観的には，角運動量があるとハミルトニアンに $\frac{l(l+1)\hbar^2}{2mr^2}$ という正符号の項がつけ加わり，これが l とともに増大することに起因することが予想される．いま，

$$\hat{H}_l = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dr^2} + \left[V(r) + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2mr^2}\right] \quad ⓐ$$

とおき，この演算子の最低固有値を $E_l^{(0)}$，その固有関数を $\chi_l^{(0)}$ とおく．ⓐより，

$$\hat{H}_{l+1} = \hat{H}_l + \frac{(l+1)\hbar^2}{mr^2}$$

となるから，

$$E_{l+1}^{(0)} = \int \chi_{l+1}^{(0)*}\hat{H}_{l+1}\chi_{l+1}^{(0)}d^3r$$

$$= \int \chi_{l+1}^{(0)*}\hat{H}_l\chi_{l+1}^{(0)}d^3r + \int \frac{(l+1)\hbar^2}{mr^2}\chi_{l+1}^{(0)*}\chi_{l+1}^{(0)}d^3r \quad ⓑ$$

右辺第1項と $E_l^{(0)}$ を比較すると，

$$\int \chi_{l+1}^{(0)*}\hat{H}_l\chi_{l+1}^{(0)}d^3r > E_l^{(0)} \quad ⓒ$$

∵　$\hat{H}_l$ の固有関数を $\chi_l^{(k)}$ とおくと，$\hat{H}_l\chi_l^{(k)} = E_l^{(k)}\chi_l^{(k)}$ ($k \neq 0$ は励起状態)．

$\chi_{l+1}^{(0)}$ を完全系 $\{\chi_l^{(k)}\}$ で展開すると，

$$\chi_{l+1}^{(0)} = \sum_k c_k\chi_l^{(k)}, \qquad \sum_k |c_k|^2 = 1$$

そうすると，これをⓒの左辺に代入すれば，ⓒの左辺 $= \sum_k |c_k|^2 E_l^{(k)}$

$$\therefore \quad \sum_k |c_k|^2 E_l^{(k)} - E_l^{(0)} = \sum_k |c_k|^2 E_l^{(k)} - E_l^{(0)}\sum_k |c_k|^2$$

$$= \sum_k |c_k|^2 (E_l^{(k)} - E_l^{(0)}) > 0$$

よって，ⓒが証明できた．また，ⓑの (右辺第2項) > 0

$$\therefore \quad E_{l+1}^{(0)} > E_l^{(0)}$$

したがって，$E_0^{(0)} < E_1^{(0)} < E_2^{(0)} < \cdots < E_l^{(0)} < E_{l+1}^{(0)} < \cdots$ が証明できた．■

粒子の角運動量 l がいろいろな値をとる状態を表すために次の慣用記号がひろく使われる．

$$\begin{array}{lcccccc} l = & 0 & 1 & 2 & 3 & 4 & 5\cdots \\ \text{に対応して} & s & p & d & f & g & h\cdots \end{array} \quad (5.52)$$

したがって中心力場を運動する粒子の基底状態は，s 状態であることが［問題 4］よりわかる．

つぎに，球対称ポテンシャルのなかでいくつかの具体例をとりあげてみよう．

5.5 球　面　波

球対称なポテンシャルのなかで最も簡単な場合は，$V=0$ の場合である．5.4節でやったように，波動関数を(5.44)のように極座標で変数分離の形に表すと，運動の恒量である l に対する動径方程式は，(5.47)で $V=0$ とおいて，

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\chi_l(r)}{dr^2}+\frac{l(l+1)\hbar^2}{2mr^2}\chi_l(r)=E\chi_l(r) \tag{5.53}$$

となる．境界条件 $\chi_l(0)=0$ を要求することにより，2つの独立な解のうち，原点近傍で $\chi_l(r)\sim r^{l+1}$ とふるまう解を選べばよいことがわかる．

$l\neq 0$ の場合も含めた一般の場合には，$\chi_l(r)$ についてよりも，もとの $R_l(r)\left(=\dfrac{\chi_l(r)}{r}\right)$ を使ったほうがつごうがよい．(5.45)で $V=0$ とおき，$k^2\equiv\dfrac{2mE}{\hbar^2}>0$ を使うと，

$$\frac{d^2R_l(r)}{dr^2}+\frac{2}{r}\frac{dR_l(r)}{dr}-\frac{l(l+1)}{r^2}R_l+k^2R_l=0 \tag{5.54}$$

を得る．無次元の変数

$$\xi=kr \tag{5.55}$$

に変換すると，

$$\frac{d^2R_l(\xi)}{d\xi^2}+\frac{2}{\xi}\frac{dR_l(\xi)}{d\xi}+\left[1-\frac{l(l+1)}{\xi^2}\right]R_l(\xi)=0 \tag{5.56}$$

となる．

球 Bessel 関数

(5.56)の解は球 Bessel 関数(付録A参照)として知られ，2つの独立な解をもつ．$\xi=0$ で正則な球 Bessel 関数は半整数次の Bessel 関数で，

$$j_l(\xi)=\left(\frac{\pi}{2\xi}\right)^{\frac{1}{2}}J_{l+\frac{1}{2}}(\xi)=(-\xi)^l\left(\frac{1}{\xi}\frac{d}{d\xi}\right)^l\left(\frac{\sin\xi}{\xi}\right) \tag{5.57}$$

と表される．$\xi=0$ で正則でない解を，球 Neumann 関数とよぶ[1)]．

$$n_l(\xi)=-(-1)^l\left(\frac{\pi}{2\xi}\right)^{\frac{1}{2}}J_{-l-\frac{1}{2}}(\xi)=-(-\xi)^l\left(\frac{1}{\xi}\frac{d}{d\xi}\right)^l\left(\frac{\cos\xi}{\xi}\right) \tag{5.58}$$

とくに最初の3つについて，j_l と n_l を書き表すと，

1)　いくつかの書物では n_l によって同じ関数の符号を変えたものを表すので注意すること．

$$j_0(\xi)=\frac{\sin\xi}{\xi}, \qquad n_0(\xi)=-\frac{\cos\xi}{\xi}$$

$$j_1(\xi)=\frac{\sin\xi}{\xi^2}-\frac{\cos\xi}{\xi}, \qquad n_1(\xi)=-\frac{\cos\xi}{\xi^2}-\frac{\sin\xi}{\xi} \tag{5.59}$$

$$j_2(\xi)=\left(\frac{3}{\xi^3}-\frac{1}{\xi}\right)\sin\xi-\frac{3}{\xi^2}\cos\xi, \qquad n_2(\xi)=-\left(\frac{3}{\xi^3}-\frac{1}{\xi}\right)\cos\xi-\frac{3}{\xi^2}\sin\xi$$

$\xi\to\infty$ で重要になる j_l と n_l の1次結合としては,

$$\begin{aligned} h_l^{(1)}(\xi)&=j_l(\xi)+in_l(\xi)\\ h_l^{(2)}(\xi)&=j_l(\xi)-in_l(\xi)=[h_l^{(1)}(\xi)]^* \end{aligned} \tag{5.60}$$

で定義される球 Hankel 関数がある．再び，最初の3項について $h_l^{(1)}$ を書くと,

$$\begin{aligned} h_0^{(1)}(\xi)&=\frac{e^{i\xi}}{i\xi}\\ h_1^{(1)}(\xi)&=-\frac{e^{i\xi}}{\xi}\left(1+\frac{i}{\xi}\right)\\ h_2^{(1)}(\xi)&=\frac{ie^{i\xi}}{\xi}\left(1+\frac{3i}{\xi}-\frac{3}{\xi^2}\right) \end{aligned} \tag{5.61}$$

となる．原点の近くでのふるまいは，$\xi\ll l$ のとき,

$$j_l(\xi)\xrightarrow[\xi\to0]{}\frac{\xi^l}{1\cdot3\cdot5\cdot\cdots\cdot(2l+1)}, \quad n_l(\xi)\xrightarrow[\xi\to0]{}-\frac{1\cdot3\cdot5\cdot\cdots\cdot(2l-1)}{\xi^{l+1}} \tag{5.62}$$

$\xi\gg l$ での漸近式は,

$$j_l(\xi)\simeq\frac{1}{\xi}\sin\left(\xi-\frac{l\pi}{2}\right), \quad n_l(\xi)\simeq-\frac{1}{\xi}\cos\left(\xi-\frac{l\pi}{2}\right)$$

$$\therefore \quad h_l^{(1)}(\xi)\simeq-\frac{i}{\xi}e^{i\left(\xi-\frac{l\pi}{2}\right)} \tag{5.63}$$

原点で正則な解は,

$$R_l(r)=j_l(kr) \tag{5.64}$$

である．

したがって，極座標における自由粒子のハミルトニアンの固有関数は,

$$j_l(kr)Y_l^m(\theta,\varphi) \tag{5.65}$$

であることがわかる．

5.6 球対称な井戸型ポテンシャル — 束縛状態

いま，球対称な井戸型ポテンシャル

$$V(r)=\begin{cases}-V_0 & (r<a)\\ 0 & (r>a)\end{cases} \tag{5.66}$$

のなかでの質量mの粒子の束縛状態($E<0$ の場合)を調べよう．5.4 節の一般論では，$\chi_l(0)=0$ の条件をとり入れるために $\chi_l(r)$ で議論したが，性質がわかったあとは，$R_l(r)$ で議論してもよい．むしろ，$R_l(r)$ を使うほうが $R_l(r)$ の対数微分の接続条件のためには便利であろう．

$r<a$ での動径方程式は，(5.45)に(5.66)を代入して，

$$\frac{d^2R_l}{dr^2}+\frac{2}{r}\frac{dR_l}{dr}-\frac{l(l+1)}{r^2}R_l+\frac{2m}{\hbar^2}(V_0+E)R_l=0 \tag{5.67}$$

$r>a$ では，

$$\frac{d^2R_l}{dr^2}+\frac{2}{r}\frac{dR_l}{dr}-\frac{l(l+1)}{r^2}R_l+\frac{2mE}{\hbar^2}R_l=0 \tag{5.68}$$

ここで，

$$\frac{2m}{\hbar^2}(V_0+E)\equiv k^2, \qquad -\frac{2mE}{\hbar^2}\equiv\rho^2 \tag{5.69}$$

とおくと，$r<a$ のとき，原点で正則な解は，

$$R_l(r)=Aj_l(kr) \tag{5.70}$$

$r>a$ での解は $r\to\infty$ で 0 に近づかなければならない．$k=i\sqrt{-\frac{2mE}{\hbar^2}}=i\rho$ とおけば，$h_l^{(1)}(i\rho r)$ のみが $r\to\infty$ で $e^{-\rho r}$ のように 0 に近づく．ゆえに，(5.68)の解は，

$$R_l(r)=Bh_l^{(1)}(i\rho r) \tag{5.71}$$

となる．$r=a$ で，R_l とその微分が等しいという条件を課すと，

$$k\frac{j_l'(ka)}{j_l(ka)}=i\rho\frac{h_l^{(1)\prime}(i\rho a)}{h_l^{(1)}(i\rho a)} \tag{5.72}$$

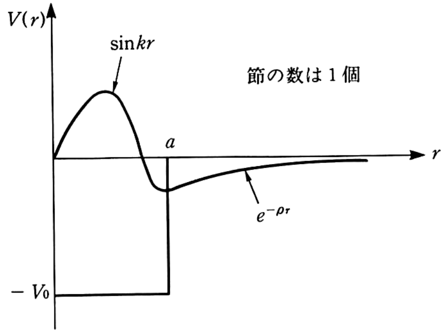
が得られる．この条件がみたされるのは，Eがあるとびとびの値をとったときだけである．これで，球対称な井戸型ポテンシャル(5.66)のなかにある粒子の束縛状態におけるエネルギー準位が定められる．s 状態($l=0$)についていえば，$\chi_0(r)=rR_0(r)$ を使って簡単に解ける．

[問題 5]　(1) 球対称な井戸型ポテンシャル(5.66)のなかにある s 状態($l=0$)の粒子の束縛状態のエネルギー準位を求めよ．

(2) 束縛状態が1個も存在しないための条件を求めよ．

(3) 束縛状態が2個存在するためには，どんな条件が必要か．また，2番目の束縛状態に対する波動関数の概形を書け．節の数はいくつあるか．

[解]　(1) $l=0$ のときは，$\chi_0(r)$ についての波動方程式は，



$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\chi_0(r)}{dr^2}-V_0\chi_0(r)=E\chi_0(r) \qquad (r<a)$$
$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\chi_0(r)}{dr^2}=E\chi_0(r) \quad (r>a) \qquad ⓐ$$

(5.69)のおきかえを使うと,

$$\frac{d^2\chi_0(r)}{dr^2}+k^2\chi_0(r)=0 \quad (r<a), \quad \frac{d^2\chi_0(r)}{dr^2}-\rho^2\chi_0(r)=0 \quad (r>a) \qquad ⓑ$$

$\chi_0(0)=0$ の要請もとり入れると,

$$\chi_0(r)=A\sin kr \ (r<a), \qquad \chi_0(r)=Be^{-\rho r} \qquad ⓒ$$

2つの解の対数微分 $\frac{1}{\chi_0}\frac{d\chi_0}{dr}$ を $r=a$ で等しいとおくと,

$$k\cot ka=-\rho \qquad ⓓ$$

が得られ,これを解くとエネルギー準位が決まる.ⓓは,1次元の問題のパリティが奇の解(3.74)と同じ形をしている.したがって,前と同様にグラフを書けば解くことができる.

(2) $V_0a^2<\frac{\pi^2\hbar^2}{8m}$

(3) $\frac{25\pi^2\hbar^2}{8m}>V_0a^2\geqq\frac{9\pi^2\hbar^2}{8m}$ ∎

[問題6] [問題5]と同じポテンシャル(5.66)で,ポテンシャルが非常に深くて $ka\gg l$ が成り立つとき,j_l の漸近形(5.63)を使って束縛エネルギー E の近似式を求めよ.

[解] $ka\gg l$ では,(5.63)を用いて,

$$j_l(ka)\underset{ka\to\infty}{\simeq}\frac{1}{ka}\sin\left(ka-\frac{l\pi}{2}\right) \qquad ⓐ$$

このとき，(5.72)の（左辺）$=-\dfrac{1}{a}+k\cot\left(ka-\dfrac{l\pi}{2}\right)$

一方，(5.72)の右辺は，$\rho=\sqrt{-\dfrac{2mE}{\hbar^2}}$ の関数で V_0 を含まない．ゆえに，$|E|\ll V_0$ のとき，$k\to$大になれば，右辺は有限なので $\cot\left(ka-\dfrac{l\pi}{2}\right)$ は0に近づかなければならない．

$$\therefore \quad ka-\frac{l\pi}{2}\simeq\left(n+\frac{1}{2}\right)\pi \tag{ⓑ}$$

$|E|\ll V_0$ だから，

$$k^2=\left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)(V_0+E)=\left(\frac{2mV_0}{\hbar^2}\right)\left(1+\frac{E}{V_0}\right)$$

$\dfrac{2mV_0}{\hbar^2}\equiv k_0{}^2$ とおくと，

$$k\simeq k_0\left(1+\frac{E}{2V_0}\right) \tag{ⓒ}$$

ⓑ，ⓒより，

$$E\simeq 2V_0\left[-1+\frac{\left(n+\dfrac{l+1}{2}\right)\pi}{k_0a}\right] \tag{ⓓ}$$

を得る．　∎

［問題 7］　無限に深い球対称な井戸型ポテンシャル

$$V(r)=\begin{cases} 0 & (r<a) \\ \infty & (r>a) \end{cases}$$

のなかでの粒子の束縛状態のエネルギー準位を求めよ．エネルギー準位の配列順序をも書け．

［解］　原点で正則な解は，$r<a$ で $Aj_l(kr)$．$r>a$ では波動関数は0．ゆえに，エネルギー準位 $E=\dfrac{\hbar^2k^2}{2m}$ は，

$$j_l(k_{nl}a)=0 \tag{ⓐ}$$

表5.1　球Bessel関数のゼロ点の値，$k_{nl}a$

n ＼ l	0	1	2	3	4	5
1	3.14	4.49	5.76	6.99	8.18	9.36
2	6.28	7.73	9.10	10.42		
3	9.42					

という条件から得られる．$k_{nl}a$ は l 次の球 Bessel 関数がゼロになる点で $n=1, 2, \cdots$ は主量子数，すなわち値の小さいほうからつけたゼロ点の番号である．表5.1より明らかなように，基底状態よりはじまる配列順序は，$1s, 1p, 1d, 2s, 1f, 2p, 1g, 2d, 1h, 3s, 2f, \cdots$ のようになる． ∎

[問題 8] 重陽子は，陽子と中性子の s 状態 $(l=0)$ の束縛状態であると仮定しよう．いま，2粒子間の相互作用が(5.66)の形の球対称井戸型ポテンシャルで与えられ，$a=2.8\times10^{-13}$ cm とする．束縛エネルギー準位が -2.23 MeV であるとき，V_0 を MeV の単位で求めよ．ただし，陽子，中性子の質量は $m=940$ MeV$\cdot c^{-2}$ とせよ．

[解] ［問題5］で得られたように，1次元のパリティが奇の解と同等になる．ゆえに，

$$k\cot ka=-\rho,\quad k^2+\rho^2=\frac{2mV_0}{\hbar^2} \qquad \text{ⓐ}$$

$ka=\xi, \rho a=\eta$ とおくと，ⓐは，

$$\xi\cot\xi=-\eta,\quad \xi^2+\eta^2=\frac{2mV_0a^2}{\hbar^2} \qquad \text{ⓑ}$$

$a=2.8\times10^{-13}$ cm, 換算質量 $\mu=m/2=470$ MeV$\cdot c^{-2}$, $E=-2.23$ MeV, $\hbar c=197$ MeV$\cdot$fm を用いると

$$\eta=\rho a=\sqrt{\frac{-2\mu E}{\hbar^2}}a=\sqrt{\frac{-2\mu c^2E}{(\hbar c)^2}}a$$
$$=\frac{\sqrt{940\text{ MeV}\times2.23\text{ MeV}}}{197\text{ MeV}\cdot\text{fm}}\times2.8\text{ fm}$$
$$=0.65$$

となる．ゆえに，$\xi\cot\xi=-0.65$ の根は，$\xi=1.90$ となる．

したがって，ⓑより，

$$V_0=\frac{\hbar^2}{2\mu a^2}(\xi^2+\eta^2)=22.8\text{ MeV}$$

となる． ∎

5.7 2体問題 — 重心運動の分離

これまでの Schrödinger 方程式は，外力の場のなかの1個の粒子の運動を記述するものであった．では，2つの粒子(たとえば原子核と電子)の間に，おたがいの距離にだけ関係する引力が働いている場合には，どうすればよいであろうか．この場合には，重心運動を相対的な運動から分離すればよい．まず，古典論の復習からはじ

めよう．

古典力学における重心運動の分離

いま，2つの粒子の質量を m_1，m_2，位置を $\boldsymbol{r}_1$，$\boldsymbol{r}_2$ としよう．この2粒子系のラグランジアンは，

$$L=T-V=\frac{m}{2}\dot{\boldsymbol{r}}_1{}^2+\frac{m}{2}\dot{\boldsymbol{r}}_2{}^2-V(|\boldsymbol{r}_1-\boldsymbol{r}_2|) \tag{5.73}$$

と記述され，対応する運動量は $\boldsymbol{p}_1=m_1\dot{\boldsymbol{r}}_1$，$\boldsymbol{p}_2=m_2\dot{\boldsymbol{r}}_2$ となる．$\boldsymbol{r}_1$，$\boldsymbol{r}_2$ のかわりに，

$$\text{重心座標 } \boldsymbol{R}=\frac{m_1\boldsymbol{r}_1+m_2\boldsymbol{r}_2}{m_1+m_2},\qquad \text{相対座標 } \boldsymbol{r}=\boldsymbol{r}_1-\boldsymbol{r}_2 \tag{5.74}$$

を導入し，これを逆に解いて次式を得る．

$$\boldsymbol{r}_1=\boldsymbol{R}+\frac{m_2}{m_1+m_2}\boldsymbol{r},\qquad \boldsymbol{r}_2=\boldsymbol{R}-\frac{m_1}{m_1+m_2}\boldsymbol{r} \tag{5.75}$$

これを(5.73)に代入すると，

$$\begin{aligned}L&=\frac{1}{2}m_1\left(\dot{\boldsymbol{R}}+\frac{m_2}{m_1+m_2}\dot{\boldsymbol{r}}\right)^2+\frac{1}{2}m_2\left(\dot{\boldsymbol{R}}-\frac{m_1}{m_1+m_2}\dot{\boldsymbol{r}}\right)^2-V(r)\\&=\frac{1}{2}M\dot{\boldsymbol{R}}^2+\frac{1}{2}\mu\dot{\boldsymbol{r}}^2-V(r),\end{aligned} \tag{5.76}$$

ただし，

$$M=m_1+m_2,\quad \mu=\frac{m_1m_2}{m_1+m_2} \tag{5.77}$$

となり，Mは全質量，μ は換算質量とよばれている．ゆえに，$\boldsymbol{R}$，$\boldsymbol{r}$ に対応する運動量は，

$$\begin{aligned}\boldsymbol{P}&=M\dot{\boldsymbol{R}}=m_1\dot{\boldsymbol{r}}_1+m_2\dot{\boldsymbol{r}}_2=\boldsymbol{p}_1+\boldsymbol{p}_2\\ \boldsymbol{p}&=\mu\dot{\boldsymbol{r}}=\frac{m_2\boldsymbol{p}_1-m_1\boldsymbol{p}_2}{m_1+m_2}\end{aligned} \tag{5.78}$$

となり，$\boldsymbol{P}$ を全運動量，$\boldsymbol{p}$ を相対運動量という．ハミルトニアンはこれらの新しい変数を用いて，

$$H=\frac{\boldsymbol{P}^2}{2M}+\frac{\boldsymbol{p}^2}{2\mu}+V(r) \tag{5.79}$$

と書きかえることができ，正準方程式より，

$$\dot{\boldsymbol{P}}=0,\qquad \dot{\boldsymbol{p}}=-\nabla V(r) \tag{5.80}$$

が得られる．したがって，重心運動は一様な直線運動，相対運動は，ポテンシャル $V(r)$ 内における質量 μ の粒子の運動である．

量子系での重心運動の分離

これまでの古典論での議論は，容易に量子論での議論におきかえられる．2つの粒

子の位置と運動量を表す演算子 $\hat{\boldsymbol{r}}_1, \hat{\boldsymbol{p}}_1, \hat{\boldsymbol{r}}_2, \hat{\boldsymbol{p}}_2$ は，

$$[\hat{r}_{1j}, \hat{p}_{1j}]=i\hbar \quad (j=1,2,3) \qquad (5.81)$$
$$[\hat{r}_{2j}, \hat{p}_{2j}]=i\hbar$$

をみたし，他はすべて交換する．

(5.74)と(5.78)と同様な公式で，新しい演算子 $\hat{\boldsymbol{R}}, \hat{\boldsymbol{r}}, \hat{\boldsymbol{P}}, \hat{\boldsymbol{p}}$ を導入し，(5.81)を使っていろいろの交換関係を計算すると，

$$[\hat{r}_j, \hat{p}_j]=i\hbar \qquad (5.82)$$
$$[\hat{R}_j, \hat{P}_j]=i\hbar$$

なる交換関係が成り立ち，他はすべて交換する．

同様に，2粒子系のハミルトニアンは，

$$\hat{H}=\frac{\hat{\boldsymbol{p}}_1{}^2}{2m_1}+\frac{\hat{\boldsymbol{p}}_2{}^2}{2m_2}+V(|r_1-r_2|) \qquad (5.83)$$

と書ける．$\hat{\boldsymbol{R}}, \hat{\boldsymbol{r}}, \hat{\boldsymbol{P}}, \hat{\boldsymbol{p}}$ は，形式的には(5.74)，(5.78)と同じであり，すべての運動量演算子は交換するから，少し計算すれば，(5.79)と同等の式

$$\hat{H}=\frac{\hat{\boldsymbol{P}}^2}{2M}+\frac{\hat{\boldsymbol{p}}^2}{2\mu}+V(r) \qquad (5.84)$$

が得られる．

$$\hat{H}_{\mathrm{CM}}=\frac{\hat{\boldsymbol{P}}^2}{2M}, \quad \hat{H}_{\mathrm{rel}}=\frac{\hat{\boldsymbol{p}}^2}{2\mu}+V(r) \qquad (5.85)$$

とおくと[1]，

$$\hat{H}=\hat{H}_{\mathrm{CM}}+\hat{H}_{\mathrm{rel}} \qquad (5.86)$$

となり，

$$[\hat{H}_{\mathrm{CM}}, \hat{H}_{\mathrm{rel}}]=0 \qquad (5.87)$$

したがって，$\hat{H}_{\mathrm{CM}}, \hat{H}_{\mathrm{rel}}$ は $\hat{H}$ とも交換する．

この場合，Schrödinger 方程式

$$\hat{H}\Phi=E\Phi \qquad (5.88)$$

の解は，

$$\Phi=\varphi_{\mathrm{CM}}(\boldsymbol{R})\varphi(\boldsymbol{r}) \qquad (5.89)$$

の形の解をもち，$\varphi_{\mathrm{CM}}(\boldsymbol{R})$ と $\varphi(\boldsymbol{r})$ は，それぞれ分離した方程式

$$\hat{H}_{\mathrm{CM}}\varphi_{\mathrm{CM}}(\boldsymbol{R})=-\frac{\hbar^2}{2M}\Delta_R\varphi_{\mathrm{CM}}(\boldsymbol{R})=E_{\mathrm{CM}}\varphi_{\mathrm{CM}}(\boldsymbol{R}) \qquad (5.90)$$

1) CM；center of mass＝重心，
rel；relative＝相対運動

$$\hat{H}_{\rm rel}\varphi(\boldsymbol{r})=\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\Delta+V(r)\right]\varphi(\boldsymbol{r})=E_{\rm rel}\varphi(\boldsymbol{r}) \tag{5.91}$$

をみたす関数である．ここで Δ_R は R 座標に関するラプラシアンである．(5.90)より，$\varphi_{\rm CM}(\boldsymbol{R})$ は質量 M の自由粒子を表す平面波のように変化する．物理的にもっとおもしろいのは，相対座標に関する(5.91)のほうである．すなわち，

2体問題をあつかう場合には，中心力ポテンシャル $V(r)$ 内を換算質量 μ の粒子が運動する1粒子の問題に帰着し，(5.7)の Schrödinger 方程式で m を μ におきかえて解けばよい．

5.8 水 素 原 子

e の電荷をもつ陽子と $-e$ の電荷をもつ電子との間に働いている Coulomb の引力は，$V(r)=-\dfrac{e^2}{r}$ という引力ポテンシャルで表されるが，これも解析的に解ける Schrödinger 方程式の数少ない例である．

水素原子の Schrödinger 方程式

5.7節でやったように，重心運動を分離すると，水素原子の Schrödinger 方程式は，電子の換算質量 $\mu=\dfrac{m_{\rm e}m_{\rm p}}{m_{\rm e}+m_{\rm p}}$ (陽子の質量 $m_{\rm p}$, 電子の質量 $m_{\rm e}$)を使い，(5.91)を参照すると，

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\Delta+V(r)\right]\varphi(\boldsymbol{r})=\left(\frac{\hat{p}_r{}^2}{2\mu}+\frac{\hat{L}^2}{2\mu r^2}-\frac{e^2}{r}\right)\varphi(\boldsymbol{r})=E\varphi(\boldsymbol{r}) \tag{5.92}$$

と書ける．$\varphi(r)=R_l(r)Y_l^m(\theta,\varphi)$ とおくと，動径方程式は，

$$\left\{-\frac{\hbar^2}{2\mu}\left(\frac{1}{r}\frac{d^2}{dr^2}r\right)+\frac{l(l+1)\hbar^2}{2\mu r^2}-\frac{e^2}{r}\right\}R_l(r)=ER_l(r) \tag{5.93}$$

となる．$-\dfrac{2\mu}{\hbar^2}$ を両辺にかけてつぎの形に書きかえておく．

$$\frac{d^2R_l}{dr^2}+\frac{2}{r}\frac{dR_l}{dr}+\frac{2\mu}{\hbar^2}\left\{E+\frac{e^2}{r}-\frac{l(l+1)\hbar^2}{2\mu r^2}\right\}R_l=0 \tag{5.94}$$

r が大きいところでは漸近的に，

$$\frac{d^2R_l}{dr^2}=-\frac{2\mu E}{\hbar^2}R_l \tag{5.95}$$

が得られ，束縛状態に対応して $E<0$ とおくと $r\to\infty$ で，

$$R_l(r)\simeq\exp\left(-\sqrt{\frac{2\mu|E|}{\hbar^2}}r\right) \tag{5.96}$$

となる．そこで無次元の独立変数

$$\rho=\sqrt{\frac{8\mu|E|}{\hbar^2}}r \tag{5.97}$$

を導入し，(5.94)を

$$\frac{d^2R_l}{d\rho^2}+\frac{2}{\rho}\frac{dR_l}{d\rho}-\frac{l(l+1)}{\rho^2}R_l+\left(\frac{\lambda}{\rho}-\frac{1}{4}\right)R_l=0 \tag{5.98}$$

ただし，$\lambda=\frac{e^2}{\hbar}\left(\frac{\mu}{2|E|}\right)^{\frac{1}{2}}=\alpha\left(\frac{\mu c^2}{2|E|}\right)^{\frac{1}{2}}$ と書きかえておくと便利である．

ρ が大きいとき，(5.95)と同様に $\frac{d^2R_l}{d\rho^2}\simeq\frac{1}{4}R_l$ なので $R_l\simeq e^{-\rho/2}$ のようにふるまう．そこで(5.98)に，

$$R_l=e^{-\frac{\rho}{2}}F_l(\rho) \tag{5.99}$$

というおきかえをすると，

$$\frac{d^2F_l}{d\rho^2}+\left(\frac{2}{\rho}-1\right)\frac{dF_l}{d\rho}+\left\{\frac{\lambda-1}{\rho}-\frac{l(l+1)}{\rho^2}\right\}F_l=0 \tag{5.100}$$

を得る．5.4 節で議論したように，(5.49) をみたすすべてのポテンシャルに対して，ρ が小さいとき，$R_l\sim\rho^l$，したがって $F_l\sim\rho^l$ とふるまうので，

$$F_l(\rho)=\rho^lL(\rho) \tag{5.101}$$

の形の解を求めることにしよう．(5.101)を(5.100)に代入すると，Lの方程式は，

$$\rho\frac{d^2L}{d\rho^2}+(2l+2-\rho)\frac{dL}{d\rho}+(\lambda-1-l)L=0 \tag{5.102}$$

となる．$L(\rho)=\sum_{n=0}^{\infty}a_n\rho^n$ を(5.102)に代入すると，

$$\sum_{n=0}^{\infty}[(n+1)\{na_{n+1}+(2l+2)a_{n+1}\}+(\lambda-1-l-n)a_n]\rho^{n-1}=0 \tag{5.103}$$

ρ^{n-1} の係数は 0 なので，

$$\frac{a_{n+1}}{a_n}=\frac{n+l+1-\lambda}{(n+1)(n+2l+2)} \tag{5.104}$$

したがって，n が大のとき $\frac{a_{n+1}}{a_n}\sim\frac{1}{n}$. 級数が無限につづくと $L(\rho)\simeq e^\rho$ となるので $R_l\sim\rho^le^{\frac{\rho}{2}}$ となり，$\rho\to\infty$ で発散する．したがって級数Lは，どこかで終わらなければならない．Lのなかで ρ の最高次のものを ρ^{n_r} $(n_r\geq 0)$ とすれば，λ をつぎのよう

1) 付録Aの合流型超幾何関数の一般論を用いて，つぎのように議論することもできる．方程式(5.102)の解は，$\rho=0$ で有限でなければならない．この条件を満足する解は，合流型超幾何関数 $F(l+1-\lambda, 2l+2, \rho)$ であり（付録A参照），無限遠で ρ の有限次の多項式でおさえられるためには，$l+1-\lambda=-n_r$ $(n_r=1,2,3,\cdots)$ でなくてはならない．すると，$\lambda=n_r+l+1=n$ という(5.105)を得る．

な正整数にとらなければならない.

$$\lambda = n_r + l + 1 \equiv n \tag{5.105}$$

n_r を動径量子数，n を主量子数とよぶ（前ページ下脚注）.

$n_r \geq 0$ だから,

1. $n \geq l+1$
2. n は正の整数
3. $\lambda = \dfrac{e^2}{\hbar}\left(\dfrac{\mu}{2|E|}\right)^{\frac{1}{2}} = n$ より，エネルギー固有値は,

$$E_n = -|E_n| = -\frac{\mu e^4}{2\hbar^2 n^2} = -\frac{1}{2}\mu c^2 \frac{\alpha^2}{n^2} \tag{5.106}$$

となり，実験とも一致する．5.6 節でとりあげた井戸型ポテンシャルの問題とちがうのは，$-\dfrac{\mu e^4}{2\hbar^2}$ と 0 の間に無数の離散的なエネルギー準位が現れるという点である．これは，r の大きいところでの Coulomb ポテンシャルの絶対値の減り方が，ゆっくりしていることによるものである.

水素原子の波動関数

$\lambda = n$ としたときの (5.102) を，つぎの微分方程式と比べてみよう.

$$\rho \frac{d^2 L_q^p}{d\rho^2} + (p+1-\rho)\ \frac{dL_q^p}{d\rho} + (q-p)L_q^p = 0 \tag{5.107}$$

この多項式解 $L_q^p(\rho)$ を Laguerre の陪多項式とよぶ．(5.102) と (5.107) を比べれば，求める多項式の解は，$p=2l+1, q=n+l$ とおけば，Laguerre の陪多項式 $L_{n+l}^{2l+1}(\rho)$ にほかならないことがわかる.

$L_{n+l}^{2l+1}(\rho)$ の具体的な表現は,

$$L_{n+l}^{2l+1}(\rho) = \sum_{k=0}^{n-l-1} (-1)^{k+2l+1} \frac{[(n+l)!]^2 \rho^k}{(n-l-1-k)!(2l+1+k)!k!} \tag{5.108}$$

波動関数の動径部分は，$e^{-\frac{\rho}{2}}\rho^l L_{n+l}^{2l+1}(\rho)$ の形をしている．規格化定数を定めるために，積分

$$\int_0^\infty e^{-\rho}\rho^{2l}[L_{n+l}^{2l+1}(\rho)]^2 \rho^2 d\rho = \frac{2n[(n+l)!]^3}{(n-l-1)!} \tag{5.109}$$

を用いると，水素原子の規格化されたエネルギー固有関数は,

$$\varphi_{nlm}(r, \theta, \varphi) = R_{nl}(r)\, Y_l^m(\theta, \varphi)$$

$$R_{nl}(r) = -\left\{\left(\frac{2}{na_0}\right)^3 \frac{(n-l-1)!}{2n[(n+l)!]^3}\right\}^{\frac{1}{2}} e^{-\frac{1}{2}\rho}\rho^l L_{n+l}^{2l+1}(\rho)$$

$$a_0 = \frac{\hbar^2}{\mu e^2}, \quad \rho = \frac{2}{na_0} r \tag{5.110}$$

となる．これらを使えば，エネルギー準位(5.106)は，

$$E_n = -\frac{e^2}{2a_0 n^2} \tag{5.111}$$

とも書くことができる．

ただし，$a_0 = \dfrac{\hbar^2}{\mu e^2} = 0.53\,\text{Å}$ は，Bohr 半径とよばれている．$n=1$ とおくと，水素原子の基底状態の束縛エネルギー

$$E_1 = -\frac{e^2}{2a_0} = -13.6\,\text{eV}$$

を得る．

例題 1 水素原子の動径波動関数を，$n=1, 2$ の場合に求め，その概型を図示せよ．

解 $(n=1, l=0), (n=2, l=0), (n=2, l=1)$ の場合，(5.110)，(5.108) より，ただちにつぎの表式が得られる．

$$R_{10}(r) = \left(\frac{1}{a_0}\right)^{\frac{3}{2}} 2\exp\left(-\frac{r}{a_0}\right)$$

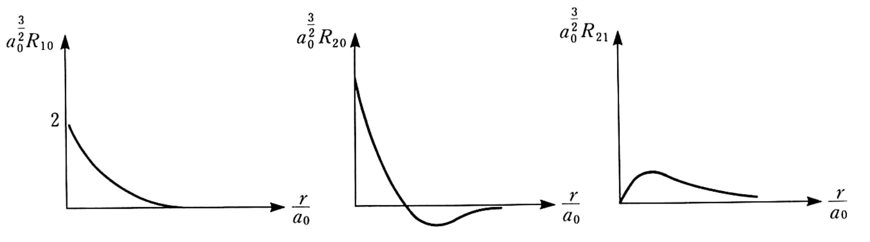


図 5.1 水素原子における $R_{nl}(r)$ と $\dfrac{r}{a_0}$ の関係

表5.2 $n=1, 2$ に対する水素原子の規格化された固有状態

分光学的記法	φ_{nlm}
1s	$\varphi_{100} = \left(\frac{1}{a_0}\right)^{\frac{3}{2}} 2\exp\left(-\frac{r}{a_0}\right) Y_0^0(\theta, \varphi)$
2s	$\varphi_{200} = \left(\frac{1}{2a_0}\right)^{\frac{3}{2}} \left(2 - \frac{r}{a_0}\right)\exp\left(-\frac{r}{2a_0}\right) Y_0^0(\theta, \varphi)$
2p	$\begin{pmatrix}\varphi_{211}\\ \varphi_{210}\\ \varphi_{21-1}\end{pmatrix} = \left(\frac{1}{2a_0}\right)^{\frac{3}{2}} \frac{r}{\sqrt{3}\,a_0} \exp\left(-\frac{r}{2a_0}\right) \begin{pmatrix}Y_1^1(\theta, \varphi)\\ Y_1^0(\theta, \varphi)\\ Y_1^{-1}(\theta, \varphi)\end{pmatrix}$

$$R_{20}(r)=\left(\frac{1}{2a_0}\right)^{\frac{3}{2}}\left(2-\frac{r}{a_0}\right)\exp\left(-\frac{r}{2a_0}\right)$$

$$R_{21}(r)=\left(\frac{1}{2a_0}\right)^{\frac{3}{2}}\frac{r}{\sqrt{3}a_0}\exp\left(-\frac{r}{2a_0}\right)$$ ∎

ここに，水素原子の規格化された固有状態のいくつかを表5.2にまとめておこう．

エネルギー・スペクトルの縮退

水素原子のエネルギー・スペクトルは，(5.105)，(5.106)で与えられたように，

表5.3　$n=1,2,3$に対してとりうるlとmの値

n	1	2		3		
l	0	0	1	0	1	2
分光学における記法	1s	2s	2p	3s	3p	3d
m	0	0	−1, 0, +1	0	−1, 0, +1	−2, −1, 0, +1, +2
各々のlに対する縮退の数	1	1	3	1	3	5
各々のnに対する縮退の数	1	4		9		

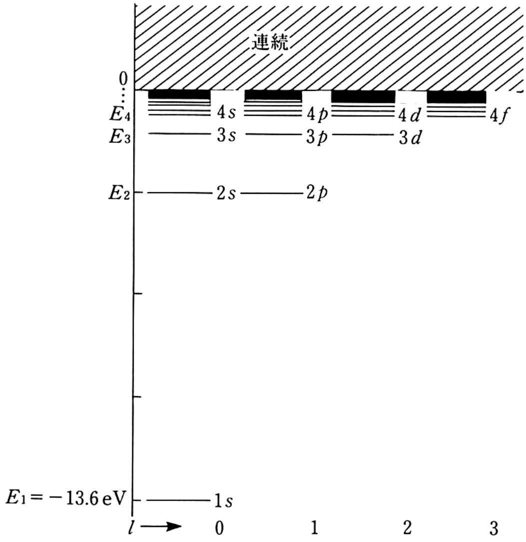


図5.2　水素原子のスペクトル

主量子数 $n=n_r+l+1$ だけで決まることに注意しよう．各エネルギー E_n に対して，n を決めると，動径量子数 $n_r \geq 0$ であるから，l は $0,1,2,\cdots,(n-1)$ の n 個の値をとることができる．さらに，それぞれの l の値に対して，mの値は，

$$-l,\ -l+1,\cdots,\ l-1,\ l$$

の $(2l+1)$ 個の値をとり得る．

したがって，1 つのエネルギー準位 E_n に対して，

$$\sum_{l=0}^{n-1}(2l+1)=n^2 \tag{5.112}$$

だけの数の縮退が存在することになる（表 5.3 を見よ）．

(5.106)で与えられる水素原子のエネルギー準位を図 5.2 に示しておこう．スペクトルの位置は，実験から得られたスペクトルときわめてよく一致していることがわかるが，微細構造については，多少問題がある．それは理論がまだ非相対論的であることのほかに，電子のスピンをまだ考慮していないからである．スピンは古典的な類似物をもたない内部自由度であって，これはあとで論じることにしよう．

動径波動関数の定性的特徴

これまで得られた水素原子のエネルギー固有関数より，いくつかの定性的な特徴をまとめておく．

1. (5.110) より明らかなように，r が小さいとき，$R_{nl}(r)\sim r^l$ のようにふるまう．これは，$l\neq 0$ のとき，遠心力障壁によって電子が原子核に近づくのを妨げられるからである．
2. 動径確率密度分布

$$P_{nl}(r)=r^2[R_{nl}(r)]^2 \tag{5.113}$$

は，$(n-l)$ 個の山をもっている．それは，(5.110) の $L_{n+l}^{2l+1}(\rho)$ が ρ の $n_r\,(=n-l-1)$ 次の多項式なので，$(n-l-1)$ 個の節（ゼロ点）をもっているからである．したがって $P(r)$ は，$(n-l)$ 個の山をもつことになる．

例題 2 (1) Ze の電荷をもつ原子核と 1 個の電子からなる水素型原子において，$l=n-1$ のとき，動径確率密度が最大になるような r の値を求めよ．

(2) 水素原子の基底状態に対して，同様な r の値を求めよ．

解 (1) 水素型原子の場合は，いままでの議論の e^2 を Ze^2 におきかえればよい．そうすると a_0 は a_0/Z におきかえることになる．与えられた n に対して，$l=n-1$ であるから，山の数は 1 個である．

$$R_{n,n-1}\propto r^{n-1}\exp\left(-\frac{Zr}{a_0 n}\right)$$

であるから，

$$P_{n,n-1}(r) \propto r^2[R_{n,n-1}(r)]^2 = r^{2n}\exp\left(-\frac{2Zr}{a_0 n}\right) \qquad ⓐ$$

極値を求めるために,

$$\frac{dP_{n,n-1}(r)}{dr} \propto \left(2nr^{2n-1} - \frac{2Z}{a_0 n}r^{2n}\right)\exp\left(-\frac{2Zr}{a_0 n}\right) = 0$$

とおくと,

$$r = \frac{n^2 a_0}{Z} \qquad ⓑ$$

で, $P_{n,n-1}(r)$ は最大になることがわかる.

(2) 水素原子の基底状態では, $n=1, l=0$ であるから, (1)において $n=1$, $Z=1$ とおけば, 求めるべき r の値は,

$$r = a_0 \qquad ⓒ$$

となる. これは, Bohr 半径に一致する. ▮

3. 波動関数が与えられると, r^k の平均値は,

$$\langle r^k \rangle = \int_0^\infty dr r^{2+k}[R_{nl}(r)]^2 \qquad (5.114)$$

として求められる. たとえば,

$$\langle r \rangle = \frac{a_0}{2}[3n^2 - l(l+1)]$$
$$\langle r^2 \rangle = \frac{n^2 a_0^2}{2}[5n^2 - 3l(l+1) + 1] \qquad (5.115)$$
$$\left\langle \frac{1}{r} \right\rangle = \frac{1}{a_0 n^2}$$

を得る(章末問題[11]参照).

[問題9] (1) 水素原子の基底状態で r の期待値を計算せよ.

(2) (1)の結果を例題2(2)の結果と比較して, 物理的意味を議論せよ.

[解] (1) 水素原子の基底状態では, $n=1$, $l=0$ であるから, 例題1の $R_{10}(r)$ を用いて,

$$\langle r \rangle = \int_0^\infty dr r^3[R_{10}(r)]^2 = 4\left(\frac{1}{a_0}\right)^3\int_0^\infty dr r^3 e^{-\frac{2r}{a_0}} = \frac{3a_0}{2} \qquad ⓐ$$

または, (5.115)の $\langle r \rangle$ の式に $n=1$, $l=0$ を代入すると, ⓐの結果が得られる.

(2) 一方, 例題2(2)の結果より, 動径確率密度が最大になる r の値は a_0 である. このように, r の期待値のほうが確率密度が最大になる r の値よりも大きい. その理由は, 動径確率密度が最大値のまわりに対称ではなく, r の大きい値のほうにひろがっているからである. ▮

[問題 10] (1) 水素型イオン $He^+, Li^{++}, Be^{+++}, \cdots$ において，Bohr 半径と基底状態のエネルギーを求めよ．

(2) つぎのそれぞれの 2 粒子系の場合，Bohr 半径と基底状態のエネルギーを求めよ．

(i) ポジトロニウム(電子と陽電子の束縛状態)

(ii) ミューオニウム(陽子と μ^- 粒子の束縛状態)

ただし，μ^- 粒子の質量を $207\,m_e$ とせよ．

[解] (1) $Z=2$ のときは，電子を 1 個失った He^+ イオン，$Z=3$ は電子を 2 個失った Li^{++} イオン，$Z=4$ は電子を 3 個失った Be^{+++} イオンの場合である．

$Z=1$ の場合，ポテンシャルは，$V=-\dfrac{e^2}{r}$ で，

$$a_0(H)=\frac{\hbar^2}{m_e e^2} \tag{a}$$

$$E_1(H)=-\frac{m_e e^4}{2\hbar^2} \tag{b}$$

となる．一般の Z に対するポテンシャルは，$V=-\dfrac{Ze^2}{r}$ であるから，ⓐ，ⓑの式で $e^2 \to Ze^2$ とおきかえればよい．

$$\therefore\quad a_0(Z)\simeq\frac{\hbar^2}{m_e Ze^2}=\frac{1}{Z}a_0(H) \tag{c}$$

$$E_1(Z)=-\frac{m_e(Ze^2)^2}{2\hbar^2}=Z^2E_1(H) \tag{d}$$

(2) (i) e^-e^+ の束縛状態であるから，(5.77) を用いて，

$$\mu(e^-e^+)=m_e/2$$

ゆえに，ⓐ，ⓑで $m_e \to m_e/2$ とおきかえると，

$$a_0(e^-e^+)=\frac{2\hbar^2}{m_e e^2}=2a_0(H) \tag{e}$$

$$E_1(e^-e^+)=\frac{1}{2}E_1(H) \tag{f}$$

(ii) ミューオニウムは，p と μ^- 粒子の束縛状態であるから，

$$\mu(\mu^-p)=\frac{m_\mu}{1+\dfrac{m_\mu}{m_p}}\simeq m_\mu$$

$$\therefore\quad a_0(\mu^-p)\simeq\frac{\hbar^2}{m_\mu e^2}\simeq\frac{1}{207}a_0(H) \tag{g}$$

$$E_1(\mu^-p)\simeq\frac{m_\mu}{m_e}E_1(H)=207E_1(H) \tag{h}$$ ∎

第5章　章 末 問 題

［1］ 質量mの粒子が下図のような3次元ポテンシャルのなかを運動している．角運動量 $l=0$ のとき，粒子の束縛状態が1個だけ存在するための条件を求めよ．

［解］ $\chi_0(r)$ に対する Schrödinger 方程式(5.47)は，$a \leqq r < b$ では，

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\chi_0(r)}{dr^2} - V_0\chi_0(r) = E\chi_0(r) \quad ⓐ$$

$b < r$ では，

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\chi_0(r)}{dr^2} = E\chi_0(r) \quad ⓑ$$

$k^2 = \dfrac{2m}{\hbar^2}(V_0 + E)$ とおけば，

$$\frac{d^2\chi_0(r)}{dr^2} + k^2\chi_0(r) = 0 \quad ⓒ$$

$\rho^2 = -\dfrac{2mE}{\hbar^2}$ とおけば，

$$\frac{d^2\chi_0(r)}{dr^2} - \rho^2\chi_0(r) = 0 \quad ⓓ$$

$\chi_0(r=a)=0$ をみたすⓒの解は，

$$\chi_0(r) = A\sin k(r-a) \quad ⓔ$$

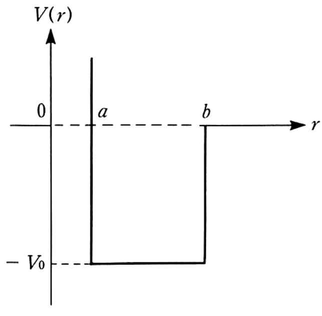
束縛状態では，$r\to\infty$ で $\chi_0(r)\to 0$ にならなければならないから，ⓓの解は，

$$\chi_0(r) = Be^{-\rho r} \quad ⓕ$$

解ⓔ，ⓕの対数微分を $r=b$ で等しいとおくと，

$$\rho = -k\cot y \quad ⓖ$$

$k(b-a) \equiv y$，$\lambda^2 = \dfrac{2mV_0(b-a)^2}{\hbar^2}$ とおくと，



$$\frac{\rho(b-a)}{y}=-\cot y$$

一方，$\rho^2(b-a)^2=-\frac{2mE}{\hbar^2}(b-a)^2$

$$=\frac{2mV_0-2m(V_0+E)}{\hbar^2}(b-a)^2$$

$$=\lambda^2-y^2$$

$$\therefore\quad \frac{\sqrt{\lambda^2-y^2}}{y}=-\cot y=\tan\left(\frac{\pi}{2}+y\right) \qquad ⓗ$$

ゆえに，粒子の束縛状態が1個だけ存在するための条件は，$\frac{1}{2}\pi<y<\frac{3}{2}\pi$.

$E=0$ とおくと，

$$\frac{\pi^2\hbar^2}{8m}<V_0(b-a)^2<\frac{9\pi^2\hbar^2}{8m}. \qquad ⓘ$$

［2］ 3次元のポテンシャル問題において，ハミルトニアンの期待値が有限であるためには，波動関数 $\varphi(r)$ は，

$$\lim_{r\to 0} r^{\frac{1}{2}}\varphi(r)=0 \qquad ①$$

をみたす必要があることを示せ.

［解］ ハミルトニアンの期待値は，

$$\langle H\rangle=\iint\sin\theta d\theta d\varphi\int_0^\infty drr^2\varphi^*\left\{\frac{1}{2m}\hat{p}_r{}^2+\frac{\hat{L}^2}{2mr^2}+V(r)\right\}\varphi \qquad ⓐ$$

ハミルトニアンのうち，$r\to0$ に近づくとき，$\frac{\hat{L}^2}{r^2}$ の項は $\frac{1}{r^2}$ のオーダー，$\hat{p}_r{}^2$ の項も $\frac{1}{r^2}$ のオーダーである．$V(r)$ の項が $\frac{1}{r^s}$ にふるまうとしたとき，第2章の章末問題［5］で調べたように，引力で $s>2$ の場合は，意味がないので考える必要がない．ⓐの｛　｝のなかは $1/r^2$ よりは大きいので，r に関する積分は $\int_0^\varepsilon dr\,|\varphi(r)|^2$ より大きい．したがって，これが有限であるためには，$\varphi(r)$ が①をみたすことが必要である.

［3］ 空間の限られた領域を，運動する粒子の運動エネルギーと位置のエネルギーの平均値の間に成り立つ一般的な関係式

$$\lim_{T\to\infty}\frac{1}{T}\int_0^T 2\langle\hat{T}\rangle dt=\lim_{T\to\infty}\frac{1}{T}\int_0^T\langle \boldsymbol{r}\cdot\nabla V\rangle dt \qquad ①$$

は**ビリアル定理**とよばれる．ここで，

$$\langle\hat{O}\rangle \equiv \int \psi^*(\boldsymbol{r}, t)\hat{O}\psi(\boldsymbol{r}, t)d^3r \qquad ②$$

と定義される.

(1) $\hat{H}=\frac{\hat{\boldsymbol{p}}^2}{2m}+V(r)$ の束縛状態を考え, ①を証明せよ. とくに, 定常状態に対しては,

$$2\langle\hat{T}\rangle=\langle\boldsymbol{r}\cdot\nabla V\rangle \qquad ③$$

が成り立つことを示せ.

(2) このビリアル定理を用いて, 調和振動子, 水素原子の場合に関係式を導け.

[解]　(1) ②の定義より,

$$\begin{aligned} i\hbar\frac{d}{dt}\langle\boldsymbol{r}\cdot\hat{\boldsymbol{p}}\rangle &= i\hbar\frac{d}{dt}\int\psi^*(\boldsymbol{r}\cdot t)\boldsymbol{r}\cdot\hat{\boldsymbol{p}}\psi(\boldsymbol{r}, t)d^3r \\ &= \int\Big\{\psi^*(\boldsymbol{r}, t)\boldsymbol{r}\cdot\hat{\boldsymbol{p}}\hat{H}\psi(\boldsymbol{r}, t) \\ &\qquad -(\hat{H}\psi(\boldsymbol{r}, t))^*(\boldsymbol{r}\cdot\hat{\boldsymbol{p}}\psi(\boldsymbol{r}, t))\Big\}d^3r \\ &= \int\psi^*(\boldsymbol{r}, t)[\boldsymbol{r}\cdot\hat{\boldsymbol{p}}, \hat{H}]\psi(\boldsymbol{r}, t)d^3r \qquad ⓐ \end{aligned}$$

ⓐの最後の行を導くためには, $\hat{H}$がエルミートであることを使った.

$\boldsymbol{r}, \hat{\boldsymbol{p}}$ の交換関係を用いると,

$$\begin{aligned} [x\hat{p}_x, \hat{H}] &= \left[x\hat{p}_x, \frac{\hat{p}_x{}^2}{2m}+V\right]=\left[x\hat{p}_x, \frac{\hat{p}_x{}^2}{2m}\right]+[x\hat{p}_x, V] \\ &= [x, \hat{p}_x{}^2]\frac{\hat{p}_x}{2m}+x[\hat{p}_x, V] \\ &= i\hbar\frac{\hat{p}_x{}^2}{m}+x[\hat{p}_x, \hat{V}] \end{aligned}$$

を得る. y, z 成分に関しても同様.

$$\therefore \quad [\boldsymbol{r}\cdot\hat{\boldsymbol{p}}, \hat{H}]=i\hbar\frac{\hat{\boldsymbol{p}}^2}{m}+\boldsymbol{r}\cdot[\hat{\boldsymbol{p}}, V] \qquad ⓑ$$

ⓐ, ⓑより,

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}\langle\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{p}\rangle &= \frac{\langle\hat{\boldsymbol{p}}^2\rangle}{m}-\int\psi^*\boldsymbol{r}\cdot[\nabla(V\psi)-V\nabla\psi]d^3r \\ &= \frac{\langle\hat{\boldsymbol{p}}^2\rangle}{m}-\int\psi^*\boldsymbol{r}\cdot(\nabla V)\psi d^3r \\ &= \frac{\langle\hat{\boldsymbol{p}}^2\rangle}{m}-\langle\boldsymbol{r}\cdot\nabla V\rangle \qquad ⓒ \end{aligned}$$

ⓒの両辺の時間平均をとると,

$$\lim_{T\to\infty}\frac{1}{T}\int_0^T dt\frac{d}{dt}\langle\boldsymbol{r}\cdot\hat{\boldsymbol{p}}\rangle=\lim_{T\to\infty}\frac{1}{T}\int_0^T dt\{2\langle\hat{T}\rangle-\langle\boldsymbol{r}\cdot\nabla V\rangle\} \qquad ⓓ$$

運動が有界であるから，任意のTに対して$|\langle \boldsymbol{r}\cdot\hat{\boldsymbol{p}}\rangle|$は有界であり，

$$ⓓの(左辺)=\lim_{T\to\infty}\frac{1}{T}\left\{\langle \boldsymbol{r}\cdot\hat{\boldsymbol{p}}\rangle_{t=T}-\langle \boldsymbol{r}\cdot\hat{\boldsymbol{p}}\rangle_{t=0}\right\}=0 \quad ⓔ$$

となる．ゆえに，ⓓの(右辺)$=0$が成り立たなければならない．よって，①が導かれた．

とくに，定常状態に対しては，$\psi(\boldsymbol{r},t)=e^{-\frac{iEt}{\hbar}}\varphi(\boldsymbol{r})$であるから，

$$\int\psi^*(\boldsymbol{r},t)\hat{O}\psi(\boldsymbol{r},t)d^3r=\int\varphi^*(\boldsymbol{r})\hat{O}\varphi(\boldsymbol{r})d^3r$$

となり，時間tに依存しない．

したがって，ⓒの(左辺)$=0$となるので，ⓒの右辺も0となり，

$$2\langle\hat{T}\rangle=\langle\boldsymbol{r}\cdot\nabla V\rangle \quad ⓕ$$

が成り立つ．

(2) 定常状態ならば，ポテンシャルエネルギーがr^nに比例しているとき，

$$2\langle\hat{T}\rangle=n\langle V\rangle \quad ⓖ$$

となる．調和振動子の場合には，$n=2$であるから，

$$\langle\hat{T}\rangle=\langle V\rangle \quad ⓗ$$

水素原子の場合には，$n=-1$であるから，

$$\langle\hat{T}\rangle=-\frac{1}{2}\langle V\rangle \quad ⓘ$$

を得る．

[4] $\hat{H}=\dfrac{\hat{p}^2}{2m}-\dfrac{Ze^2}{r}$のとき，$\chi_l=rR_{nl}(r)$に対する有効ポテンシャルを考えることにより，与えられた束縛エネルギー固有値に対し，とりうるlに上限があることを示せ．

[解] 5.4節でみたように，χ_lに対する有効ポテンシャルは，

$$V(r)=-\frac{Ze^2}{r}+\frac{l(l+1)\hbar^2}{2mr^2} \quad ⓐ$$

となる．あるlに対して，与えられたエネルギーE_Bの束縛状態が存在するためには，$V(r)$の極小値$<E_B$でなければならない．ここで$V(r)$の極小値を求めてみよう．

$V'(r)=\dfrac{Ze^2}{r^2}-\dfrac{l(l+1)\hbar^2}{mr^3}=0$とおけば，$r_{min}=\dfrac{l(l+1)\hbar^2}{Ze^2m}$

で極小になる．

$$\therefore\quad V_{min}=-\frac{1}{2}\frac{mZ^2e^4}{l(l+1)\hbar^2}<-|E_B| \quad ⓑ$$

$$\therefore \quad \frac{mZ^2e^4}{2\hbar^2|E_B|} > l(l+1) \tag{ⓒ}$$

したがって，l の値には上限があることがわかる．

［5］ ポテンシャル

$$V(r) = -V_0\delta(r-a) \quad (V_0>0) \tag{①}$$

をもつ中心力場のなかを運動する質量 m の粒子が束縛状態をもつために必要な最小の V_0 の値を求めよ．

［解］ 波動関数を $\varphi = \dfrac{\chi_l(r)}{r} Y_l^m(\theta, \varphi)$ とおくと，$\chi_l(r)$ のみたす Schrödinger 方程式は，

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\chi_l(r)}{dr^2} + \left[V(r) + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2mr^2}\right]\chi_l(r) = E\chi_l(r) \tag{ⓐ}$$

最小の V_0 の値を求めるためには，$l=0$ の基底状態をもつ条件を調べればよい．

$r \neq a$ のところでは，

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\chi_0(r)}{dr^2} = E\chi_0(r).$$

$E<0$ であるから，$\rho^2 \equiv \dfrac{2m|E|}{\hbar^2}$ とおくと，

$$\frac{d^2\chi_0(r)}{dr^2} - \rho^2\chi_0(r) = 0 \tag{ⓑ}$$

$r<a$ では $\chi_0(r=0)=0$ をみたすには，

$$\chi_0(r) = A\sinh\rho r \tag{ⓒ}$$

$r>a$ では，

$$\chi_0(r) = Be^{-\rho r} \tag{ⓓ}$$

でなければならない．$r=a$ で $\chi_0(r)$ が連続という条件から，

$$A\sinh\rho a = Be^{-\rho a} \tag{ⓔ}$$

を得る．つぎに，

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\chi_0(r)}{dr^2} - V_0\delta(r-a)\chi_0(r) = E\chi_0(r)$$

を，$r=a$ を含む狭い領域 $(a-\varepsilon, a+\varepsilon)$ で積分すると，

$$\chi_0'(a+\varepsilon) - \chi_0'(a-\varepsilon) + \frac{2mV_0}{\hbar^2}\chi_0(a) = 0$$

ⓒ,ⓓを代入すると，

$$\rho Be^{-\rho a} + \rho A\cosh\rho a = \frac{2mV_0}{\hbar^2}\chi_0(a) \tag{ⓕ}$$

ⓔ, ⓕより，$\coth\rho a=\frac{2mV_0}{\hbar^2}\frac{1}{\rho}-1$ となるので，$\rho a=\xi$ とおけば，

$$\coth\xi=\frac{2mV_0a}{\hbar^2}\frac{1}{\xi}-1 \qquad ⓖ$$

を得る．したがって，ⓖの両辺が $\xi>0$ で等しくなればよい．とくに ξ が小さいときには，

$$\frac{1}{\xi}\simeq\frac{2mV_0a}{\hbar^2}\cdot\frac{1}{\xi}-1$$

ゆえに，$\xi>0$ に解をもつためには，$V_0>\frac{\hbar^2}{2ma}$ であればよい．

[6] アルカリ金属の原子では，$(Z-1)$ 個の電子が閉殻の安定した構造をつくり，いちばん外側の1個の電子が有効電荷 $+e$（核の電荷 Ze と閉殻の電荷 $-(Z-1)e$ の和）のまわりを運動しているため，水素原子と似たスペクトルをもっている．いま，ポテンシャルが第1近似で，

$$V(r)=-\frac{e^2}{r}-\frac{Ae^2}{r^2} \qquad (A>0) \qquad ①$$

で与えられているとき，次の問いに答えよ．

(1) このときのエネルギー固有値は，主量子数を n とすれば，

$$E=-\frac{me^4}{2\hbar^2}\frac{1}{(n+\sigma)^2}, \qquad \sigma=-A\frac{me^2}{\hbar^2}\frac{1}{l+\frac{1}{2}} \qquad ②$$

で与えられることを示せ．

(2) $Z=3$ の Li 原子の $2s, 2p, 3s, 3p, 3d$ 準位を水素原子の場合に比べて図示せよ．

[解] (1) 波動関数を $\varphi=R(r)Y_l^m(\theta,\varphi)$ とおくと，動径方向の Schrödinger 方程式 (5.45) は，

$$\frac{d^2R}{dr^2}+\frac{2}{r}\frac{dR}{dr}+\frac{2m}{\hbar^2}\left[E-\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2}+\frac{Ae^2}{r^2}+\frac{e^2}{r}\right]R=0 \qquad ⓐ$$

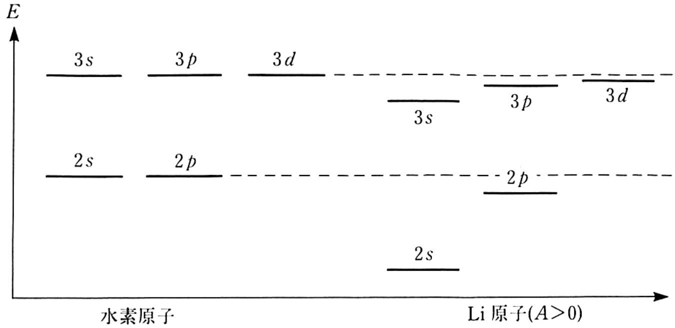
水素原子のときと同様に，$\rho=\sqrt{\frac{8m|E|}{\hbar^2}}r$ とおくと，

$$R''+\frac{2}{\rho}R'+\left[-\frac{1}{4}+\frac{\lambda}{\rho}-\frac{s(s+1)}{\rho^2}\right]R=0 \qquad ⓑ$$

ただし，

$$\lambda\equiv\frac{e^2}{\hbar}\left(\frac{m}{2|E|}\right)^{\frac{1}{2}} \qquad ⓒ$$

$$s(s+1)=l(l+1)-\frac{2me^2}{\hbar^2}A \qquad ⓓ$$



そこで，

$$R=\rho^s e^{-\frac{\rho}{2}}L(\rho) \tag{e}$$

とおくと，

$$\rho L''+(2s+2-\rho)L'+(\lambda-s-1)L=0 \tag{f}$$

したがって，

$$L=F(-\lambda+s+1,\ 2s+2,\ \rho) \tag{g}$$

のように合流型超幾何関数に帰着できる(付録 A 参照)．ⓓより，

$$s=-\frac{1}{2}\pm\sqrt{\left(l+\frac{1}{2}\right)^2-\frac{2me^2}{\hbar^2}A} \tag{h}$$

となるが，波動関数が規格化できるためには，$s>-\dfrac{1}{2}$ をみたさなければならない．ゆえに，ⓗで符号は＋を選び，クーロンポテンシャルからのずれAが小さいとみなして s を展開すれば，

$$\begin{aligned} s&=-\frac{1}{2}+\sqrt{\left(l+\frac{1}{2}\right)^2-\frac{2me^2}{\hbar^2}A} \\ &\simeq-\frac{1}{2}+\left(l+\frac{1}{2}\right)\left\{1-\frac{me^2}{\hbar^2}A\frac{1}{\left(l+\frac{1}{2}\right)^2}\right\} \\ &=l+\sigma \end{aligned}$$

ただし，

$$\sigma=-\frac{me^2}{\hbar^2}A\frac{1}{l+\frac{1}{2}} \tag{i}$$

Fが多項式でなければ，$\rho\to\infty$ のとき，$e^{\frac{\rho}{2}}$ のように発散するので，$F(\alpha,\beta,$

$\rho)$ は多項式でなければならない．そのための条件は，

$$\alpha=-\lambda+s+1=-n_r \quad (n_r=0,1,2,\cdots)$$

$$\therefore \quad \lambda=n_r+s+1=n_r+l+\sigma+1=n+\sigma \qquad ⓙ$$

$$\therefore \quad E=-\frac{me^4}{2\hbar^2}\frac{1}{(n+\sigma)^2} \qquad ⓚ$$

が得られた．

(2) ⓘの σ が l に依存するため，Li 原子の場合，水素原子のときの l についての縮退はとけている．l が大きくなるほど，水素原子に近づくことがわかる．

[7] 3次元の調和振動子のハミルトニアンは，

$$\hat{H}=\frac{\hat{\boldsymbol{p}}^2}{2m}+\frac{m\omega^2}{2}r^2$$

で与えられる．

(1) 直交座標を用いて，変数分離によって1次元の場合に帰着せよ．エネルギー準位の異なる状態を下から4組とって，そのエネルギー，パリティと縮退度を示せ．

(2) この問題を極座標を用いて解くと，固有状態は (E_n, l, l_z) で記述される．ただし，$l=0,1,2,\cdots$ は粒子の角運動量の量子数，$l_z=-l,-l+1,\cdots,+l$ は，その z 成分の量子数である．パリティと各状態の縮退度の知識を使って，(1)で求めた4組に対して，角運動量の値を推論せよ [l をもつ状態のパリティは $(-1)^l$]．

[解] (1) 直交座標を用いて，

$$\hat{H}=\hat{H}_x+\hat{H}_y+\hat{H}_z \qquad ⓐ$$

$$\hat{H}_x=\frac{1}{2m}\hat{p}_x{}^2+\frac{m\omega^2}{2}x^2, \quad \hat{H}_y=\frac{\hat{p}_y{}^2}{2m}+\frac{m\omega^2}{2}y^2, \quad \hat{H}_z=\frac{\hat{p}_z{}^2}{2m}+\frac{m\omega^2}{2}z^2$$

$$\varphi(x,y,z)=\varphi_1(x)\varphi_2(y)\varphi_3(z)$$

$$\therefore \quad (\hat{H}_x+\hat{H}_y+\hat{H}_z)\varphi_1\varphi_2\varphi_3=E\varphi_1\varphi_2\varphi_3$$

$\varphi_1\varphi_2\varphi_3$ で両辺をわって変数分離をすると，$\hat{H}_x\varphi_1(x)=E_1\varphi_1(x)$，$y, z$ 成分についても同様．

$$\therefore \quad E_i=\hbar\omega\left(n_i+\frac{1}{2}\right), \qquad i=1,2,3\,;\ n_i=0,1,2,\cdots$$

$$\therefore \quad E=\hbar\omega\left(n+\frac{3}{2}\right), \qquad \text{ただし，} n=n_1+n_2+n_3 \qquad ⓑ$$

パリティは，

$$P=P_1\cdot P_2\cdot P_3=(-1)^{n_1+n_2+n_3}=(-1)^n \qquad ⓒ$$

$n=n_1+n_2+n_3$ $(n_1\geqq 0, n_2\geqq 0, n_3\geqq 0)$ をみたし，3個のものから重複を許して n 個とり出す方法の数は，

表5.4　ある n に対する (n_1, n_2, n_3) の選び方とエネルギー準位 E_n，パリティ P と縮退度

n	$(n_1,\ n_2,\ n_3)$	E_n	P	縮退度
0	0 0 0	$\left(\frac{3}{2}\right)\hbar\omega$	+1	1
1	1 0 0 0 1 0 0 0 1	$\left(\frac{5}{2}\right)\hbar\omega$	−1	3
2	1 1 0 0 1 1 1 0 1 2 0 0 0 2 0 0 0 2	$\left(\frac{7}{2}\right)\hbar\omega$	+1	6
3	1 1 1 2 1 0 1 2 0 2 0 1 1 0 2 0 2 1 0 1 2 3 0 0 0 3 0 0 0 3	$\left(\frac{9}{2}\right)\hbar\omega$	−1	10

$$ {}_3\mathrm{H}_n = {}_{n+2}\mathrm{C}_2 = \frac{(n+2)(n+1)}{2} \qquad ⓓ $$

ⓓにおいて，$n=0,1,2,3$ とおくと，表 5.4 のように縮退度が求まる．

(2) 状態を $(E_n,\ l,\ l_z)$ で記述する．$P=(-1)^l$

エネルギーは l_z によらないから，

$n=0$ のとき，$P=1$，　(縮退度)$=1$　∴　$l=0$

$n=1$ のとき，$P=-1$，　(縮退度)$=3$　∴　$l=1$

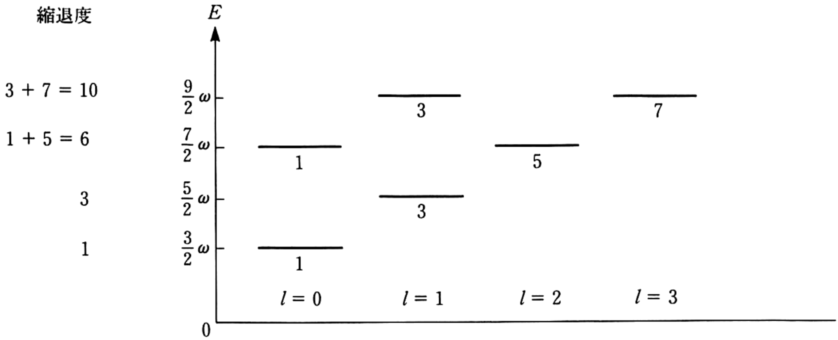
$n=2$ のとき，$P=1$，　(縮退度)$=6$　∴　$l=2,0$

$n=3$ のとき，$P=-1$，　(縮退度)$=10$　∴　$l=3,1$

［8］［7］の 3 次元調和振動子の固有エネルギーを極座標表示で求め，［7］(2)の結果を確かめよ．

［解］　波動関数を $\varphi=\dfrac{\chi(r)}{r}Y_l^m(\theta,\ \varphi)$ とおくと，$\chi(r)$ のみたす Schrödinger 方程式は，

$$ \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dr^2}+\frac{m\omega^2}{2}r^2+\frac{l(l+1)\hbar^2}{2mr^2}\right]\chi=E\chi \qquad ⓐ $$



となる．計算を簡単にするため，$m=\hbar=1$ のユニット をとると，

$$\hat{h}\equiv-\frac{1}{2}\frac{d^2}{dr^2}+\frac{\omega^2}{2}r^2+\frac{l(l+1)}{2r^2} \tag{b}$$

を用いて，

$$\hat{h}\chi=E\chi \tag{c}$$

となる．変数 $\xi\equiv r^2$ を導入すると，

$$\hat{h}=-2\xi\frac{d^2}{d\xi^2}-\frac{d}{d\xi}+\frac{\omega^2}{2}\xi+\frac{l(l+1)}{2\xi} \tag{d}$$

を得る．求める解は，$\xi\to\infty$ のとき漸近的に $e^{-\frac{\omega}{2}\xi}$ のようにふるまい，ξ の小さいところでは，$\xi^\beta\left(\beta=\frac{1}{2}+\frac{l}{2}\right)$ のようにふるまう．したがって，解を，

$$\chi=e^{-\frac{\omega}{2}\xi}\xi^\beta v(\xi) \tag{e}$$

の形におくと，

$$\hat{h}''=-2\xi\frac{d^2}{d\xi^2}+[2\omega\xi-(2l+3)]\frac{d}{d\xi}+\frac{\omega}{2}(2l+3) \tag{f}$$

を用いて，v に対しては，方程式

$$\hat{h}''v=Ev \tag{g}$$

が得られる．ここで，$\omega\xi=\eta$ とおけば，

$$\left\{\eta\frac{d^2}{d\eta^2}+\left(\frac{2l+3}{2}-\eta\right)\frac{d}{d\eta}+\left(\frac{E}{2\omega}-\frac{2l+3}{4}\right)\right\}v=0 \tag{h}$$

となる．ⓗのみたす解は合流型超幾何関数であり，

$$v=F\left(\frac{3+2l}{4}-\frac{E}{2\omega},\ \frac{3+2l}{2}\ ;\ \eta\right) \tag{i}$$

となる(付録A参照)．Fが無限遠で多項式になるためには，

$$\frac{3+2l}{4}-\frac{E}{2\omega}=-n_r \qquad (n_r=0,1,2,\cdots). \tag{j}$$

$$\therefore \quad E=\frac{\omega}{2}(3+2l+4n_r) \tag{k}$$

が得られる．[7](2)の結果と比較するため，ⓚを用いてエネルギー準位を $l=0,1,2,3$ に対して図示しておく（前ページ）．

[9] ポテンシャルエネルギー

$$V(r)=\frac{A}{r^2}+Br^2$$

をもつ球対称場のなかを運動する粒子のエネルギー準位を求めよ．

[解] $\varphi=\dfrac{\chi(r)}{r}Y_l^m(\theta,\varphi)$ とおくと，Schrödinger 方程式は，

$$\frac{d^2\chi}{dr^2}+\frac{2m}{\hbar^2}\left[E-\frac{l(l+1)\hbar^2}{2mr^2}-\frac{A}{r^2}-Br^2\right]\chi=0$$

$\hbar=m=1$ のユニットをとると，

$$\frac{d^2\chi}{dr^2}+2\left[E-\frac{l(l+1)}{2r^2}-\frac{A}{r^2}-Br^2\right]\chi=0 \tag{a}$$

ここで $\xi=\sqrt{2B}\,r^2$ とおき，

$$\alpha=\sqrt{\frac{2}{B}}E, \qquad \gamma=l(l+1)+2A \tag{b}$$

を導入すると，方程式

$$\xi\frac{d^2\chi}{d\xi^2}+\frac{1}{2}\frac{d\chi}{d\xi}+\frac{1}{4}\left(\alpha-\frac{\gamma}{\xi}-\xi\right)\chi=0 \tag{c}$$

を得る．$\xi\to\infty$ で有界な解 $\sim e^{-\frac{1}{2}\xi}$，また，$\xi=0$は方程式の特異点だから，

$$\chi=\xi^\beta e^{-\frac{1}{2}\xi}v, \quad \beta>0 \qquad (\because \quad \chi(0)=0) \tag{d}$$

とおいてみる．ⓓをⓒに代入し，ξ^{-1} の係数 $\beta(\beta-1)+\frac{1}{2}\beta-\frac{\gamma}{4}=0$，と $\beta>0$ を用いて，

$$\beta=\frac{1}{4}\left\{1+\sqrt{(2l+1)^2+8A}\right\} \tag{e}$$

が得られ，v の方程式は，

$$\xi\frac{d^2v}{d\xi^2}+\left(2\beta+\frac{1}{2}-\xi\right)\frac{dv}{d\xi}-\left(\beta+\frac{1}{4}-\frac{\alpha}{4}\right)v=0 \tag{f}$$

となる．

$$\therefore \quad v = F\left(\beta + \frac{1}{4} - \frac{\alpha}{4}, \ 2\beta + \frac{1}{2} ; \xi\right) \tag{g}$$

v が $\xi \to \infty$ で有界であるためには,

$$\beta + \frac{1}{4} - \frac{\alpha}{4} = -n_r \qquad (n_r = 0, 1, 2, \cdots) \tag{h}$$

ゆえに，エネルギー準位は,

$$E_{n_r l} = \sqrt{\frac{B}{2}}\left\{4n_r + 2 + \sqrt{(2l+1)^2 + 8A}\right\} \tag{i}$$

となる.

[10] $\hat{H} = \dfrac{\hat{\boldsymbol{p}}^2}{2m} - \dfrac{Ze^2}{r}$ なるハミルトニアンをもつ水素型原子を考えよう．Kramers の漸化式

$$Z^2\left(\frac{k+1}{n^2}\right)\langle r^k \rangle - Z(2k+1)a_0\langle r^{k-1}\rangle + \frac{k}{4}[(2l+1)^2 - k^2]a_0{}^2\langle r^{k-2}\rangle = 0 \tag{1}$$

を証明せよ．ただし，a_0 は Bohr 半径，$\langle \ \ \rangle$ は $\varphi_{nlm}(\boldsymbol{r}) = R_{nl}(r)Y_l{}^m(\theta, \varphi)$ による期待値で，$k > -(2l+1)$.

$\left[\text{ヒント：} \displaystyle\int_0^\infty r^{k+1}\chi'\chi'' dr \ (\chi \equiv rR_{nl}) \text{ を部分積分してみよ}\right]$

[解] $\chi \equiv rR_{nl}$ とおくと，Schrödinger 方程式は,

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dr^2}(rR_{nl}) + \left\{\frac{l(l+1)\hbar^2}{2mr^2} - \frac{Ze^2}{r} - E\right\}(rR_{nl}) = 0$$

簡単のため，$m = e = \hbar = 1$ のユニットを用いると,

$$-\frac{1}{2}\frac{d^2}{dr^2}\chi + \left\{\frac{l(l+1)}{2r^2} - \frac{Z}{r} - E\right\}\chi = 0 \tag{a}$$

となる．つぎの積分 I を計算してみよう．ⓐを使うと,

$$I = \int_0^\infty r^{k+1}2\chi'\chi'' dr = \int_0^\infty \left\{\frac{l(l+1)}{r^2} - \frac{2Z}{r} - 2E\right\} r^{k+1}2\chi\chi' dr \tag{b}$$

$$\text{ⓑの（左辺）} = r^{k+1}\chi'^2\Big|_0^\infty - (k+1)\int_0^\infty r^k \chi'^2 dr \tag{c}$$

$$\int_0^\infty r^k\chi'^2 dr = r^k\chi'\chi\Big|_0^\infty - k\int r^{k-1}\chi'\chi dr - \int r^k\chi''\chi dr$$

$$\int_0^\infty r^{k-1}\chi'\chi dr = r^{k-1}\frac{\chi^2}{2}\Big|_0^\infty - \frac{k-1}{2}\int r^{k-2}\chi^2 dr$$

$$\int_0^\infty r^k\chi''\chi dr = l(l+1)\langle r^{k-2}\rangle - 2Z\langle r^{k-1}\rangle - 2E\langle r^k\rangle$$

をⓒに代入すると,

$$\text{ⓑ の（左辺）} = \left\{r^{k+1}\chi'^2 - (k+1)r^k\chi'\chi + k(k+1)r^{k-1}\frac{\chi^2}{2}\right\}\Big|_0^\infty$$

$$-\frac{(k-1)k(k+1)}{2}\langle r^{k-2}\rangle$$

$$+(k+1)\{l(l+1)\langle r^{k-2}\rangle-2Z\langle r^{k-1}\rangle-2E\langle r^{k}\rangle\} \qquad ⓓ$$

一方，ⓑの(右辺) $=\int\{l(l+1)r^{k-1}-2Zr^{k}-2Er^{k+1}\}\frac{d}{dr}(\chi^2)dr$

$$=\{l(l+1)r^{k-1}-2Zr^{k}-2Er^{k+1}\}\chi^2\Big|_0^\infty$$

$$-(k-1)l(l+1)\langle r^{k-2}\rangle+2Zk\langle r^{k-1}\rangle+2E(k+1)\langle r^{k}\rangle \qquad ⓔ$$

$r\sim 0$ で，$\chi\sim r^{l+1}$，$\chi'\sim r^{l}$ とふるまうので，$2l+1+k>0$ ならば，境界の寄与は 0 となる．

$$\therefore\quad -2E(k+1)\langle r^{k}\rangle-Z(2k+1)\langle r^{k-1}\rangle+\frac{k}{4}\{(2l+1)^2-k^2\}\langle r^{k-2}\rangle=0 \qquad ⓕ$$

を得る．$E=-\dfrac{Z^2}{2n^2}$ をⓕに代入し，$m=e=\hbar=1$ のユニットでは，$a_0=\dfrac{\hbar^2}{me^2}=1$ であることに注意すると，①が証明されたことになる．

[11]　(1) [10]の Kramers の漸化式を用いて，$\langle 1/r\rangle$，$\langle r\rangle$，$\langle r^2\rangle$ の値を計算せよ．

(2) とくに，$l=n-1$ のとき，$\Delta r\equiv\sqrt{\langle r^2\rangle-\langle r\rangle^2}$ を求めよ．

[解]　(1) [10]の漸化式で，$k=0$ とおくと，

$$\frac{Z^2}{n^2}\langle 1\rangle-Za_0\langle\frac{1}{r}\rangle=0$$

$$\therefore\quad \langle\frac{1}{r}\rangle=\frac{Z}{n^2a_0} \qquad ⓐ$$

$k=1$ とおくと，

$$Z^2\frac{2}{n^2}\langle r\rangle-3Za_0\langle 1\rangle+\frac{1}{4}\{(2l+1)^2-1\}a_0{}^2\langle\frac{1}{r}\rangle=0$$

ⓐを代入すると，

$$\langle r\rangle=\frac{a_0}{2Z}\{3n^2-l(l+1)\} \qquad ⓑ$$

$k=2$ とおくと，

$$Z^2\frac{3}{n^2}\langle r^2\rangle-5Za_0\langle r\rangle+\frac{1}{2}\{(2l+1)^2-4\}a_0{}^2\langle 1\rangle=0$$

$$\therefore\quad \langle r^2\rangle=\frac{n^2a_0{}^2}{2Z^2}\{5n^2-3l(l+1)+1\} \qquad ⓒ$$

(2) ⓑで $l=n-1$ とおくと，

$$\langle r\rangle=\frac{a_0}{Z}\left(n+\frac{1}{2}\right)n \qquad ⓓ$$

ⓒで $l=n-1$ とおくと，

$$\langle r^2\rangle=\frac{a_0{}^2}{Z^2}n^2\left(n+\frac{1}{2}\right)(n+1) \qquad ⓔ$$

$$\therefore\quad \Delta r=\sqrt{\langle r^2\rangle-\langle r\rangle^2}=\sqrt{2n+1}\ \frac{na_0}{2Z} \qquad ⓕ$$

となる．

[12] 水素原子の 1s 状態について，平均 2 乗速度$\dfrac{\sqrt{\langle\hat{\boldsymbol{p}}^2\rangle}}{m}$を計算せよ．それは光の速さの何分の 1 程度であるか．

[解] [3]のⓘより，$\langle\hat{T}\rangle=-\dfrac{1}{2}\langle V\rangle$

$$\therefore\quad \frac{1}{2m}\langle\hat{\boldsymbol{p}}^2\rangle=\frac{1}{2}\left\langle\frac{e^2}{r}\right\rangle$$

$$\therefore\quad \langle\hat{\boldsymbol{p}}^2\rangle=me^2\left\langle\frac{1}{r}\right\rangle=\frac{me^2}{a_0}=\frac{m^2e^4}{\hbar^2} \qquad ⓐ$$

$$\therefore\quad 平均2乗速度=\frac{1}{m}\frac{me^2}{\hbar}$$

$$=\frac{e^2}{\hbar}=c\cdot\frac{e^2}{\hbar c}$$

$$=\frac{c}{137} \qquad ⓑ$$

すなわち，光の速さの $\dfrac{1}{137}$ 倍になる．

第6章　量子力学の体系

これまでの章では，古典力学を修正することによって量子力学を構成し，それが実際にうまく自然現象を記述していることをみた．そこでわかったように，量子力学は，古典力学の枠組みのなかで展開されるものではなくて，まったく別の体系であるとみなしたほうがよい．第6章では，古典力学のイメージからいったんはなれて，量子力学固有の体系がどのようなものであるかを議論する．

6.1 量子力学の枠組み

古典力学は，それじしんで完結した体系であり，それによって巨視的な自然現象はうまく記述できる．ところが，原子や原子核くらいの微視的なスケールまで含めて自然を記述しようとすると，古典力学では不十分であり，量子力学が必要になる．前章までの議論でわかったように，Schrödinger 方程式を使えば，原子のスペクトルなどに現れるような粒子の微視的な運動を正しく記述できるのみならず，波束の運動として古典力学的な極限もうまく再現される．本節では，Schrödinger 方程式を少し形式的な立場からみなおして，量子力学のもついろいろな側面を分析しやすい形にまとめておこう．

まず，第5章までで考えたSchrödinger 方程式がどのようにして構成されたかを思い出しておこう．ある系が，古典力学的な極限では，正準変数 p_i, q_i $(i=1,2,\cdots,n)$ およびハミルトニアン $H(p,q)$ で記述されているとする．この系を微視的な領域まで含めて記述するために，つぎの手順を経て理論を構成した．

(1) 系の瞬間的な状態は，波動関数 $\psi(q)$ によって表されているものとする．ここで，$\psi(q)$ は q_i $(i=1,\cdots,n)$ の複素数値関数である．また，$\psi(q)$ の絶対的な大きさには意味がない．すなわち，任意の複素数 c に対して，$\psi(q)$ と $c\psi(q)$ は同じ状態を表すとする．

(2) $\hat{q}_i$ を $\psi(q)$ に q_i をかける演算子，$\hat{p}_i$ を $\psi(q)$ に対する微分演算子 $\dfrac{\hbar}{i}\dfrac{\partial}{\partial q_i}$ として定義する．同様に，任意の古典的な物理量 $O(p,q)$ に対して，対応する演算子 $\hat{O}$ を $O(p,q)$ のなかの p_i を $\hat{p}_i$ に，q を $\hat{q}_i$ におきかえることにより作る．

(3) 状態の時間発展は，Schrödinger 方程式

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(q,t)=\hat{H}\psi(q,t) \tag{6.1}$$

により記述されるとする．ここで，$\hat{H}$ は古典的なハミルトニアン $H(p,q)$ から(2)のおきかえによって作られた演算子である．

(4) 波動関数の間に内積をつぎの式で定義し，

$$(\psi_1,\psi_2)=\int d^n q\,\psi_1(q)^*\psi_2(q) \tag{6.2}$$

波動関数が $\psi(q)$ であるような状態における物理量 O の期待値 $\langle\hat{O}\rangle$ をつぎの式で定義する．

$$\langle\hat{O}\rangle=\frac{(\psi,\hat{O}\psi)}{(\psi,\psi)} \tag{6.3}$$

このように定義した $\langle\hat{O}\rangle$ を，波動関数が $\psi(q)$ であるような状態において，物理量 O を観測したときの期待値と解釈する(確率解釈)．

以上のようにして量子力学を構成したが，これをもう少し形式的にながめてみよう．まず，波動関数全体は $q_i\ (i=1, 2, \cdots, n)$ の関数全体であり，自然な形でベクトル空間になっている．すなわち，2 つの関数 $\psi_1(q), \psi_2(q)$ に対してその和 $\psi_1(q)+\psi_2(q)$ が定義できるし，関数 $\psi(q)$ の複素数倍 $c\psi(q)$ も定義できる．また，Schrödinger 方程式(6.1)はこのベクトル空間の構造に対して線型な方程式である．よって，$\psi_1(q, t)$ および $\psi_2(q, t)$ が Schrödinger 方程式の解であれば，任意の複素数 c_1, c_2 に対して，$\psi(q, t)=c_1\psi_1(q, t)+c_2\psi_2(q, t)$ も Schrödinger 方程式の解である．これが重ね合わせの原理であり，量子力学の最も基本的な原理である．

また，確率解釈が成り立つためには，実数の物理量に対応する演算子はエルミートでなければならないことに注意しよう．さもなければ，(6.3)のような量は，必ずしも実数値とはならないからである．とくに，ハミルトニアン $\hat{H}$ はエネルギーという実数の量に対応しているから，エルミートでなければならない．また，(6.2)で与えられた内積は正定値であること，すなわち，任意の恒等的には 0 でない ψ に対して，$(\psi, \psi)>0$ となっていることにも注意しよう．そのおかげで，(6.3)のような量がどのような ψ に対しても定義できるのである．もし，内積が正定値でなければ，0 でないある ψ に対して $(\psi, \psi)=0$ となり，そのような ψ に対しては確率解釈ができなくなってしまう．これらの事実をまとめて抽象的に表現すると，量子力学はつぎのような形で自然現象を記述しているといえるだろう．

量子力学の基本的な枠組み

(1)′ 系の瞬間的な状態は，正定値の内積をもつベクトル空間の元 ψ として表される．そのような空間を状態空間とよび，その元を状態ベクトルとよぶ．ただし，ψ とそのスカラー倍 $c\psi$ は同じ状態を表しているものとする．

(2)′ 物理量は，状態空間上のエルミートな演算子で表される．とくに，ハミルトニアン $\hat{H}$ はエルミートである．

(3)′ 時間発展は，時間について 1 階で線型な Schrödinger 方程式で表される．

$$i\hbar\frac{d}{dt}\psi=\hat{H}\psi \tag{6.4}$$

(4)′ 物理量 $\hat{O}$ の期待値といわれる量 $\langle\hat{O}\rangle$ を，

$$\langle\hat{O}\rangle=\frac{(\psi, \hat{O}\psi)}{(\psi, \psi)} \tag{6.5}$$

で定義し，状態 ψ において物理量 $\hat{O}$ を観測したときの期待値と解釈する．

このように，具体的に(1)～(4)で与えられていたものを，わざわざ(1)′～(4)′ のように抽象的にいいかえたのは，いくつかのご利益があるからである．たとえば，量子化の手続きには，(1)～(4)のようなSchrödinger 流の方法のほかにも，Heisenberg 流の行列力学や，Feynman による経路積分の方法[1]など見かけ上異なったものがあるが，(1)′～(4)′ のように表現しておくと，それらが同値であることがみやすくなる．また，(1)′～(4)′ は量子力学のきわめて一般的な枠組みを与えている．たとえば，第7章で議論するように，電子などのいろいろな粒子は，スピンとよばれる古典力学の枠組みのなかでは表現できないような自由度をもっており，Schrödinger 方程式は(6.1)のように構成しただけではだめで少し変更を施さなければならない．そうすると，状態空間は単なる座標の関数がつくる関数空間ではなくなってしまうが，やはり抽象的には(1)′～(4)′ の構造をもっている．さらに，第11章でみるように，同種粒子系を考えると，波動関数にはある制限をおかなければならないことになるが，そのようにしたあとも，やはり，(1)′～(4)′ の構造をみたしている．また，相対論的量子力学，すなわち場の量子論も(1)′～(4)′ の枠組みに入っており，実験ときわめてよく一致する結果を与えている．このように，(1)′～(4)′ は量子力学の基本的な枠組みを宣言しているものといえる．

ハミルトニアンがエルミートであることの帰結として，時間発展がユニタリー変換で表されることに注意しておこう．これは第12章でみるように，散乱振幅のユニタリー性などの基本となるものである．実際，Schrödinger 方程式(6.4)は，t について簡単に積分できてつぎのように書ける．

$$\psi(t)=\hat{U}(t,t_0)\,\psi(t_0) \tag{6.6 a}$$

$$\hat{U}(t,t_0)=\exp\left(-\frac{i}{\hbar}\hat{H}(t-t_0)\right) \tag{6.6 b}$$

ここで，$\psi(t)$ は時刻 t における状態ベクトルを表す．また，ここに現れた演算子 $\hat{U}(t,t_0)$ はユニタリーであることがつぎの計算によりわかる．

$$\begin{aligned}\hat{U}(t,t_0)^\dagger\,\hat{U}(t,t_0)&=\exp\left(\frac{i}{\hbar}\hat{H}(t-t_0)\right)\exp\left(-\frac{i}{\hbar}\hat{H}(t-t_0)\right)\\&=1\end{aligned} \tag{6.7}$$

すなわち，(6.6 a)に示されているように，時間発展は1つのユニタリー変換になっている．このことから，状態ベクトルの内積は時間に依存しないこと，とくにノルム[2]は時間によらず一定であることは明らかであろう．

1) Heisenberg-Jordan の行列力学は，後出の正準交換関係に包含されている．経路積分については16章を参照せよ．

2) ベクトル ψ のノルムとは (ψ,ψ) のことである．

[問題1]　ハミルトニアンが時間の関数であっても，時間発展はユニタリーであることを示せ．

[解]　ハミルトニアンを t の関数として，$\hat{H}(t)$ と書こう．このとき，任意の2つの状態ベクトルの内積が時間によらないことを示せばよい．実際，

$$
\begin{aligned}
&\frac{d}{dt}(\psi_1(t), \psi_2(t)) \\
&=\left(\frac{d}{dt}\psi_1(t), \psi_2(t)\right)+\left(\psi_1(t), \frac{d}{dt}\psi_2(t)\right) \\
&=\left(\frac{1}{i\hbar}\hat{H}(t)\psi_1(t), \psi_2(t)\right)+\left(\psi_1(t), \frac{1}{i\hbar}\hat{H}(t)\psi_2(t)\right) \\
&=-\frac{1}{i\hbar}(\hat{H}(t)\psi_1(t), \psi_2(t))+\frac{1}{i\hbar}(\psi_1(t), \hat{H}(t)\psi_2(t)) \\
&=-\frac{1}{i\hbar}(\psi_1(t), \hat{H}(t)\psi_2(t))+\frac{1}{i\hbar}(\psi_1(t), \hat{H}(t)\psi_2(t)) \\
&=0
\end{aligned}
$$

ここで，最後から2番目の等式を得るために，$\hat{H}(t)$ がエルミートであることを使った．　∎

6.2　量子力学における確率と物理量の測定

量子力学では系の状態は波動関数で表され，その時間発展は，Schrödinger 方程式により一意的に決定される．それにもかかわらず，系を観測しようとすると，たとえ観測前の系の状態を完全に知っていても，観測結果がどのようになるかを予測できないという事態が生じる．

具体的に考えるために，図6.1のような状況を考えよう．図の左下におかれた光源からは，光子が1つずつ時間間隔をおいて，つぎつぎに放出されており，光子は，ハーフミラーを通ったあとに検出器AまたはBによって検出される．観測者は，2つの検出器をながめており，各光子がどちらの検出器で検出されたか測定している．光源から波束として放出された光子は，ハーフミラーを通過したあとのある時刻では，図で a と表されている波束に対応する状態 ψ_a と b と表されている波束に対応する状態 ψ_b の量子力学的な重ね合わせ $c_a\psi_a+c_b\psi_b$ になっている(ここで，ψ_a, ψ_b は1に規格化されているとする．また，波束 a と波束 b は重なりがないから，明らかに $(\psi_a, \psi_b)=0$ である)．

このような状況の実験は，実際に行うことができるが，たとえ光源からつぎつぎに出て来る光子がいつも同じ状態であるようにしておいても，各回ごとの観測結果

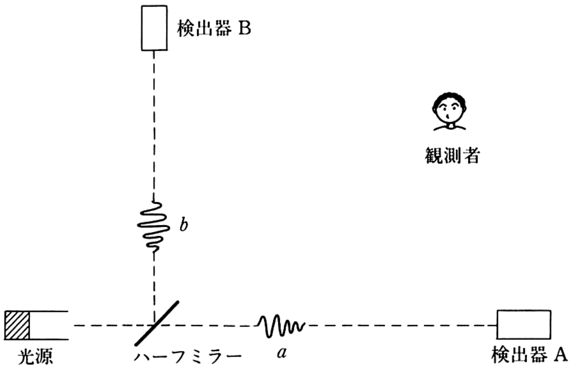


図6.1 ハーフミラーを通過したあとの光子を検出する

はばらばらであり，あるときは検出器Aが光子を検出し，またあるときは検出器Bが光子を検出する．しかし，その結果を統計的にみると，確定した確率分布に従っており，各回に検出器Aで検出される確率は$|c_a|^2$で与えられ，検出器Bで検出される確率は$|c_b|^2$で与えられる(ここで，ハーフミラーを通った後の光子の状態ベクトル，$c_a\psi_a+c_b\psi_b$は，1に規格化されている．すなわち$|c_a|^2+|c_b|^2=1$とする)．

これは，たとえ微視的な系の波動関数を知っていても，観測の結果を確率的にしか予言できないということであり，一見，自然法則が決定論的ではないようにみえる．実際，いろいろな実験結果を総合すると，つぎのような確率解釈が成り立っているようにみえる．

確率解釈

系の状態空間の任意の一組の正規直交基底をψ_i $(i=1,2,\cdots)$とする．観測装置をうまく作って，系の状態がψ_iであれば，必ず数値x_iを表示するようにできたとする(ここで$i\neq j$なら$x_i\neq x_j$としておく)．$\psi=\sum_i c_i\psi_i$で与えられるような状態をこの観測装置で測定するということを何度も繰り返す．観測装置は，各回ごとに数値x_iをばらばらに示すが，統計的にみると，1回の測定によって数値x_iを示す確率p_iは，

$$p_i=|c_i|^2=|(\psi_i,\psi)|^2 \tag{6.8}$$

で与えられる．ただし，ここでψは1に規格化されているとしている．

これは，つぎのようにいいかえることもできる．いま，物理量として，エルミートな演算子 $\hat{X}$ を考える．これを対角化するような正規直交基底を ψ_i $(i=1,2,\cdots)$ とし，対応する固有値を x_i $(i=1,2,\cdots)$ とする．このとき，$\hat{X}$ を観測する観測装置とは，上で考えたようなものであるといってよいだろう．そうすると，(6.8)から，状態 ψ に対する1回の観測による $\hat{X}$ の期待値は，

$$\langle\hat{X}\rangle=\sum_i p_i x_i=(\psi, X\psi) \tag{6.9}$$

で与えられることがわかる(本ページ［問題2］参照)．

このように，実際の観測において，確率が現れてしまうのは実験的な事実であるが，ここで現れる確率の正体は何であろうか．1つの極端な立場として，系の時間発展には，2種類の本質的にちがう過程があると認めてしまうこともできる．その1つは，Schrödinger 方程式に従う決定論的な過程であり，もう1つは観測という非決定論的な過程であるとするのである．

しかしながら，これとはまったく反対の立場をとって，本質的な発展方程式は Schrödinger 方程式だけであるが，見かけ上確率が現れていると考えることもできる．そのような考え方のなかで，比較的すっきりしているものに，多世界解釈(many world interpretation)とよばれているものがある．一般に，量子力学における確率の起源を考えることは，観測問題とよばれており種々の議論がなされているが，いまのところ，従来の確率解釈を本質的に超えるものにはなっていない．

［問題2］　(1) (6.8)から(6.9)を導け．

(2) 逆に，任意のエルミート演算子 $\hat{X}$ の1回の観測による期待値が $\langle\hat{X}\rangle$ で与えられることを仮定して，(6.8)を導け．

［解］　(1) $\psi=\sum_i c_i\psi_i$ という状態に対して，1回の $\hat{X}$ の観測の結果，x_i という値を得る確率が $p_i=|c_i|^2$ であるから，$\hat{X}$ の期待値は，

$$\langle\hat{X}\rangle=\sum_i p_i x_i=\sum_i x_i|c_i|^2 \tag{ⓐ}$$

で与えられる．一方，

$$\psi=\sum_i c_i\psi_i, \qquad \hat{X}\psi=\sum_i c_i x_i\psi_i$$

であるから，ψ_i が正規直交であることより，

$$(\psi, \hat{X}\psi)=\sum_i x_i|c_i|^2 \tag{ⓑ}$$

を得る．ⓐ，ⓑより(6.9)が得られる．

(2) ある決まった i に対して，物理量の演算子として ψ_i への射影子 $\hat{P}_i$ を考えよう．すなわち，$\psi=\sum_i c_i\psi_i$ に対して，

$$\hat{P}_i\psi = c_i\psi_i \qquad ⓒ$$

とする．これは，状態が ψ_i にあれば1を与え，ψ_i と直交する状態にあれば0を与えるような演算子であると考えられる．それゆえ，$\hat{P}_i$ の期待値とは，状態が ψ_i にある確率 p_i にほかならない．すなわち，

$$\langle \hat{P}_i \rangle = p_i \qquad ⓓ$$

一方，演算子 $\hat{P}_i$ の1回の測定に対する期待値に対して，(6.9)が成り立つとすると，$\langle \hat{P}_i \rangle = (\psi, \hat{P}_i\psi)$ であるが右辺にⓒを使うと，

$$\langle \hat{P}_i \rangle = |c_i|^2 \qquad ⓔ$$

が得られる．ⓓとⓔより(6.8)を得る．　∎

6.3　ブラ・ケット記号

前節まででみたように，量子力学の枠組みは内積をもつベクトル空間上で展開されている．それゆえ，原理的には，通常の線型代数で使われている記法で十分であるが，実際に計算を進めるときには，Dirac によってはじめられたブラ・ケット記号を使うと便利なことが多い．6.3節では，ブラ・ケット記号の定義と，それに慣れるためのいくつかの例をとりあげてみよう．

まず，簡単のため有限次元の場合を考える．n 成分の複素たてベクトルをケット・ベクトルあるいは単に，ケットとよび，$|v\rangle$ という記号で書くことにする．これは，v という名前のベクトルを $\vec{v}$ と書くかわりに $|v\rangle$ と書いただけである．同様に，n 成分の複素よこベクトルをブラ・ベクトルあるいは単に，ブラとよび，$\langle u|$ という記号で書こう．ここで，1つの約束事として，同じ名前のついたブラ・ベクトルとケット・ベクトルは，たがいに転置共役の関係にあるとしよう．すなわち，

$$|v\rangle = \begin{pmatrix} v_1 \\ v_2 \\ \vdots \\ v_n \end{pmatrix} \tag{6.10}$$

ならば，$\langle v|$ は，

$$\langle v| = (|v\rangle)^\dagger = (v_1{}^*, v_2{}^*, \cdots, v_n{}^*) \tag{6.11}$$

を表すものとする．

ところで，ケット・ベクトルはたてベクトルであるから n 行1列の行列とみなし，同様に，ブラ・ベクトルはよこベクトルであるから1行 n 列の行列とみなすことにしよう．そうすると，行列のかけ算としてケット・ベクトル $|v\rangle$ とブラ・ベクトル $\langle u|$ の2通りの積が定義できる．すなわち，$\langle u\|v\rangle$ は1行1列の量，すなわち1つの複素数であり，$|v\rangle\langle u|$ は n 行 n 列の正方行列である．具体的には，

$$|v\rangle=\begin{pmatrix} v_1 \\ v_2 \\ \vdots \\ v_n \end{pmatrix},\quad \langle u|=(u_1{}^*, u_2{}^*, \cdots, u_n{}^*) \tag{6.12}$$

に対して，

$$\langle u\|v\rangle=(u_1{}^*, \cdots, u_n{}^*)\begin{pmatrix} v_1 \\ \vdots \\ v_n \end{pmatrix}=u_1{}^*v_1+\cdots+u_n{}^*v_n, \tag{6.13 a}$$

$$|v\rangle\langle u|=\begin{pmatrix} v_1 \\ \vdots \\ v_n \end{pmatrix}(u_1{}^*, \cdots, u_n{}^*)=\begin{pmatrix} v_1u_1{}^*\cdots v_1u_n{}^* \\ \vdots \qquad \vdots \\ v_nu_1{}^*\cdots v_nu_n{}^* \end{pmatrix} \tag{6.13b}$$

である[1]．また，もう1つの約束事として，(6.13 a)の左辺 $\langle u\|v\rangle$ のようにたて棒が2本重なったときは，単に $\langle u|v\rangle$ と1本だけ書くことにしよう．

n 行 n 列の行列 $\hat{M}$ とブラ・ベクトル $\langle u|$ やケット・ベクトル $|v\rangle$ の積も，行列の積として同様に定義される．すなわち，$\hat{M}|v\rangle$ は $n\times n$ 行列と $n\times 1$ 行列の積であるから $n\times 1$ 行列，すなわちケット・ベクトルである．同様にして，$\langle u|\hat{M}$ はブラ・ベクトルであり，$\langle u|\hat{M}|v\rangle$ は1つの複素数であることも明らかであろう．

ブラ・ベクトル $\langle u|$ とケット・ベクトル $|v\rangle$ をかけあわせて，(6.13 a)のように1つの複素数 $\langle u|v\rangle$ を作ることを，$\langle u|$ と $|v\rangle$ を縮約するということが多い．(6.13 a)から明らかなように，$\langle u|v\rangle$ は $|u\rangle$ に対応するベクトルと，$|v\rangle$ に対応するベクトルの内積にほかならない．線型代数の普通の記法では，2つのベクトル u と v の内積を (u,v) と書くが，ここでは，それをよこベクトル $\langle u|$ とたてベクトル $|v\rangle$ の積とみなしたわけである．$\langle u|v\rangle$ をあわせて1つの括弧(ブラケット)ができあがるので，$\langle u|$ をブラ，$|v\rangle$ をケットとよんだのである．

ここまでは，たてベクトルやよこベクトルとしてケットやブラを考えてきたが，それを抽象的なベクトル空間の言葉でいいかえておこう．出発点として，内積(,)をもつ n 次元のベクトル空間 V を考える．ケット・ベクトルとは，以前の議論では n 行1列の行列のことであったが，これは，抽象的には複素数全体のなす1次元空間 $\boldsymbol{C}$ から n 次元空間 V への線型写像ということである．すなわち，V の元 v に対応するケット・ベクトル $|v\rangle$ とは，つぎに定義される $\boldsymbol{C}$ から V への線型写像として定義するのが自然である．

---

1)　ここまでくると，ブラ・ケット記号 $|\quad\rangle$ や $\langle\quad|$ の意味がわかるだろう．すなわち，たて棒 $|$ は n 成分であることを示し，$\rangle$ や $\langle$ は1成分であることを示しているのである．そうすると，$|v\rangle$，$\langle u|$，$\langle u\|v\rangle$，$|v\rangle\langle u|$ などの両端の形をみれば，それぞれ，$n\times 1$，$1\times n$，1×1，$n\times n$ の行列であることがわかる．

$$|v\rangle : \boldsymbol{C} \longrightarrow V$$
$$|v\rangle(x) = xv,\ x \in \boldsymbol{C} \tag{6.14}$$

一方，ブラ・ベクトルとは，以前の議論では1行n列の行列のことであったが，これは抽象的にはn次元空間Vから1次元空間$\boldsymbol{C}$への線型写像ということである．すなわち，Vの元vに対応するブラ・ベクトル$\langle v|$とはつぎに定義されるVから$\boldsymbol{C}$への線型写像のこととする．

$$\langle v| : V \longrightarrow \boldsymbol{C}$$
$$\langle v|(w) = (v, w),\quad w \in V \tag{6.15}$$

このようにして，Vの元に対応するブラ・ベクトルおよびケット・ベクトルを定義すると，線型写像の合成として，自然に$\langle u \| v\rangle$や$|v\rangle\langle u|$が定義される．実際，$\langle u \| v\rangle$は$\boldsymbol{C}$から$\boldsymbol{C}$への線型写像であり，$|v\rangle\langle u|$はVからVへの線型写像であることは明らかであろう．以前の場合と同様に，$\langle u \| v\rangle$などは単に$\langle u | v\rangle$と書くことにしよう．ところで，$\boldsymbol{C}$から$\boldsymbol{C}$への線型写像とは，ある定数αをかけるという作用にほかならないから，それをαと同一視することにしよう．そうすると，以下の例題に示すように，

$$\langle u | v\rangle = (u, v) \tag{6.16 a}$$
$$\langle u | \hat{T} | v\rangle = (u, \hat{T}v) \tag{6.16 b}$$

が成り立つことがわかる．ここで，$\hat{T}$はVからVへの線型写像である．

例題 1　(6.16 a)および(6.16 b)を示せ．

解　(i)　$\langle u|v\rangle$は，$\langle u| : V \to \boldsymbol{C}$と$|v\rangle : \boldsymbol{C} \to V$を合成したものであるから，明らかに$\boldsymbol{C}$から$\boldsymbol{C}$への線型写像である．任意の$x \in \boldsymbol{C}$に対して，

$$\begin{aligned}\langle u|v\rangle(x) &= \langle u|(|v\rangle(x)) && [(6.14)]\\ &= \langle u|(xv) && [(6.15)]\\ &= (u, xv) && [\text{内積の性質}]\\ &= x(u, v)\end{aligned}$$

すなわち，$\langle u|v\rangle$は(u, v)をかけるという$\boldsymbol{C}$から$\boldsymbol{C}$への線型写像である．定数αをかけるという線型写像をαじしんと同一視すると，(6.16 a)が得られる．ここで考えている同一視は，以前の言葉でいうと，1×1行列を1つの複素数とみなすということである．

(ii)　$\hat{T}|v\rangle$は，$\hat{T} : V \to V$と$|v\rangle : \boldsymbol{C} \to V$を合成したものであるから，$\boldsymbol{C}$から$V$への線型写像である．任意の$x \in \boldsymbol{C}$に対して，

$$\begin{aligned}\hat{T}\,|v\rangle(x) &= \hat{T}(|v\rangle(x)) \\ &= \hat{T}(xv) && [(6.14)] \\ &= x\hat{T}v && [\hat{T}\text{ の線型性}]\end{aligned}$$

となるが，最後の表式は，(6.14) より，$|\hat{T}v\rangle(x)$ とも書ける．よって，

$$\hat{T}\,|v\rangle = |\hat{T}v\rangle$$

であること，すなわち．$\hat{T}|v\rangle$ は $\hat{T}v$ に対応するケット・ベクトルにほかならないことがわかる．$\langle u|$ と $|Tv\rangle$ に対して (6.16 a) を用いると，(6.16 b) が得られる．■

以上で述べたように，ブラ・ベクトルはよこベクトル，ケット・ベクトルはたてベクトル，演算子は行列とみなしてそれらのかけ算は行列としてのかけ算という具合に考えていればよいが，一応それを形式的に整理しておくとつぎのようになる．

(1) ブラ・ベクトルの全体およびケット・ベクトルの全体はそれぞれ複素ベクトル空間である．

(2) ブラ・ベクトルとケット・ベクトルは反線型な写像によって 1 対 1 に対応している．これを随伴とよび † で表す．以下，随伴によって移るブラ・ベクトルとケット・ベクトルは同じ記号でラベルすることにする．すなわち，

$$(|v\rangle)^\dagger = \langle v| \tag{6.17}$$

この約束のもとで，随伴の反線型性は，

$$(\lambda|u\rangle + \mu|v\rangle)^\dagger = \lambda^*\langle u| + \mu^*\langle v| \tag{6.18}$$

と表される．

(3) ブラ・ベクトル $\langle v|$ とケット・ベクトル $|w\rangle$ の対から複素数への非退化かつ双線型な写像 $\langle v|w\rangle$ があり，(6.17) の約束のもとで，

$$\langle v|w\rangle^* = \langle w|v\rangle \tag{6.19}$$

をみたす．これをブラとケットの縮約とよぶ．このとき，

$$(|v\rangle, |w\rangle) = \langle v|w\rangle \tag{6.20}$$

で左辺の量を定義すると，それは $|w\rangle$ については線型，$|v\rangle$ については反線型になっており，ケット・ベクトルの空間に内積を定義している．さらに任意のゼロでない $|v\rangle$ に対して，

$$\langle v|v\rangle > 0 \tag{6.21}$$

が成り立っていれば，(6.20) で定義される内積は正定値である．

(4) 演算子はケット・ベクトルには左から，ブラ・ベクトルには右から作用する．具体的には，演算子を $\hat{O}$ として，

$$|v\rangle \mapsto \hat{O}|v\rangle \tag{6.22 a}$$

$$\langle w| \mapsto \langle w|\hat{O} \tag{6.22 b}$$

また，任意の $|v\rangle, \langle w|$ に対して

$$(\langle w|\hat{O})|v\rangle = \langle w|(\hat{O}|v\rangle) \tag{6.23}$$

が成り立ち，これを $\langle w|\hat{O}|v\rangle$ と書く．

(5) ケット・ベクトル $|w\rangle$ とブラ・ベクトル $\langle v|$ が与えられたとき，演算子 $|w\rangle\langle v|$ をつぎの式で定義する．

$$(|w\rangle\langle v|)|u\rangle = |w\rangle(\langle v|u\rangle) \qquad (\text{任意の } |u\rangle \text{ に対して}) \tag{6.24}$$

ここで，右辺はケット・ベクトル $|w\rangle$ に $\langle v|u\rangle$ というスカラー量をかけたものである(この表式のようにベクトルにスカラーをかけるときは，どちらをさきに書いてもよいものとする)．(6.24) と同様に，演算子 $|w\rangle\langle v|$ をブラ・ベクトル $\langle u|$ に作用させると，

$$\langle u|(|w\rangle\langle v|) = (\langle u|w\rangle)\langle v| \tag{6.25}$$

となる．

(6) 任意のケット・ベクトル $|v\rangle$ と演算子 $\hat{O}$ に対して，

$$(\hat{O}|v\rangle)^\dagger = \langle v|\hat{O}^\dagger \tag{6.26}$$

が成り立つ．ここで，$\hat{O}^\dagger$ は $\hat{O}$ のエルミート共役である．

基底のとりかえに対する変換則

ブラ・ケット記号を用いる１つの利点は，状態空間の基底の変換がみやすくなることである．その基本になるのがつぎの事実である．いま，$|\xi_i\rangle$ $(i=1,2,\cdots)$ が正規直交な完全系になっているとする．このとき単位演算子１はつぎの形に分解される．

$$\sum_i |\xi_i\rangle\langle\xi_i| = 1 \tag{6.27}$$

これを示すためには，左辺の演算子を任意のケット・ベクトルに作用させても不変であることを示せばよい．そのためには，左辺を $|\xi_j\rangle$ $(j=1,2,\cdots)$ に作用させたときに不変であることを示せば十分である．なぜならば，$|\xi_j\rangle$ $(j=1,2,\cdots)$ は完全系と仮定したから，任意のケット・ベクトルはその線型結合で書けるからである．そこで (6.27) の左辺を $|\xi_j\rangle$ にかけてみると，

$$\sum_i |\xi_i\rangle\langle\xi_i|\xi_j\rangle = \sum_i |\xi_i\rangle\delta_{ij} = |\xi_j\rangle \tag{6.28}$$

となり，たしかに不変であることがわかる．

(6.27) の両辺をケット・ベクトル $|\psi\rangle$ に作用させると，

$$|\psi\rangle = \sum_i \langle\xi_i|\psi\rangle|\xi_i\rangle \tag{6.29}$$

となるが，これは，$|\psi\rangle$ を $|\xi_i\rangle$ $(i=1,2,\cdots)$ で展開したときの展開係数が $\langle\xi_i|\psi\rangle$ で与えられることを示している．これを少し一般化すると，つぎの例題のような事

実が成り立つ．

例題 2　$|\eta_i\rangle$ $(i=1,2,\cdots)$ を，完全系ではあるが正規直交であるとは限らないものとする．このとき，同様な系 $|\zeta_i\rangle$ $(i=1,2,\cdots)$ で，

$$\langle\zeta_i|\eta_j\rangle=\delta_{ij}$$

をみたすものを $\{|\eta_i\rangle\}$ の双対基底とよぶ．これに対して，つぎの式が成り立つことを示せ．

(1) $\sum_i|\zeta_i\rangle\langle\eta_i|=\sum_i|\eta_i\rangle\langle\zeta_i|=1$

(2) 任意のケット・ベクトル $|\psi\rangle$ に対し，

$$|\psi\rangle=\sum_i\langle\zeta_i|\psi\rangle|\eta_i\rangle=\sum_i\langle\eta_i|\psi\rangle|\zeta_i\rangle$$

解　(2)は(1)の両辺に $|\psi\rangle$ を右からかけたものであるから，(1)を示せば十分である．また，もとの仮定は，$|\eta_i\rangle$ と $|\zeta_i\rangle$ の入れかえに対して対称であるから，(1)の2番目の等号，すなわち，

$$\sum_i|\eta_i\rangle\langle\zeta_i|=1$$

を示せば十分である．$\{|\eta_i\rangle\}$ は完全系であるから，この左辺を $|\eta_j\rangle$ にかけても不変であることを示せばよい．実際，

$$\sum_i|\eta_i\rangle\langle\zeta_i|\eta_j\rangle=\sum_i|\eta_i\rangle\delta_{ij}=|\eta_j\rangle$$

である．　∎

また，(6.27)の応用として，基底のとりかえに対するつぎの式が簡単に導かれる．いま，$|\xi_i\rangle$ $(i=1,2,\cdots)$ および $|\xi_i'\rangle$ $(i=1,2,\cdots)$ をそれぞれ正規直交基底とする．このとき，(6.29)で示されるように，ケット・ベクトル $|\psi\rangle$ の $\{|\xi_i\rangle\}$ および $\{|\xi_i'\rangle\}$ による展開の係数は，$\langle\xi_i|\psi\rangle$ および $\langle\xi_i'|\psi\rangle$ で与えられるが，それらは，

$$\langle\xi_i'|\psi\rangle=\sum_j\langle\xi_i'|\xi_j\rangle\langle\xi_j|\psi\rangle \tag{6.30}$$

により結びついている．これは，(6.27)を，

$$1=\sum_j|\xi_j\rangle\langle\xi_j| \tag{6.31}$$

のように書いて，左から $\langle\xi_i'|$，右から $|\psi\rangle$ をかけただけである．このように，ブラ・ケット記号は必ずしも本質的ではないが，そのおかげで基底の導入やとりかえが非常に見通しのいいものになっている．

ここまでの議論は，完全系として離散的なものを考えたが，連続変数でラベルされるような完全系に対しても同様の結果を得ることができる．具体的な例として，ブラ・ベクトル全体のなすベクトル空間も，ケット・ベクトル全体のなすベクトル空間も，1変数 q の関数全体からなる関数空間とし，随伴は単に関数の複素共役とす

る．そうすると関数 $f(q)$ をケット・ベクトルとみなしたときに $|f\rangle$ と書くことにすると，(6.17)の約束のもとで，$\langle g|$ は $g(q)^*$ という関数を表すことになる．つぎに，ブラとケットの縮約を，単にそれらが表す関数の積をとって q で積分したものとする．すなわち，

$$\langle g|f\rangle=\int dq\, g(q)^* f(q) \tag{6.32}$$

これは，明らかに(6.19)および(6.21)をみたしており，波動関数に対するふつうの内積である．ところで，q' にピークをもつ δ-関数 $\delta(q-q')$ を考えると，もちろん，任意の q の関数 $f(q)$ はそれらの重ね合わせとして書ける．すなわち，

$$f(q)=\int dq' f(q')\delta(q-q') \tag{6.33}$$

これは，$\delta(q-q')$ を q' でラベルされている q の関数と考えたとき，それらは完全系をなすことを示している．このような δ-関数をケット・ベクトルとみなしたものを，新たに記号を導入して $|q'\rangle$ と書くことにする．

$$|q'\rangle \longleftrightarrow \delta(q-q') \tag{6.34}$$

そうすると，ここで考えている縮約の定義から，

$$\langle q''|q'\rangle=\int dq\, \delta(q-q'')^*\delta(q-q')=\delta(q'-q'') \tag{6.35}$$

となる[1]．

まとめると，$\{|q'\rangle\}$ は完全系をなし，正規直交条件の連続版ともいえる，

$$\langle q''|q'\rangle=\delta(q'-q'') \tag{6.36}$$

をみたす．このとき，(6.27)と類似の次式が成り立つ．

$$\int dq'\,|q'\rangle\langle q'|=1 \tag{6.37}$$

例題 3　(6.37)を示せ．

解　$\{|q'\rangle\}$ は完全系をなすから，(6.37)の左辺を $|q''\rangle$ にかけても不変であることを示せば十分である．これは，

$$\int dq'\,|q'\rangle\langle q'|q''\rangle=\int dq'\,|q'\rangle\delta(q'-q'')=|q''\rangle$$

となり，確かに成り立つ．　∎

---

1)　ここで記号が少し混乱する恐れがあるので注意しておこう．$|f\rangle$ や $|g\rangle$ のように $|\ \rangle$ 記号のなかに q 以外の文字が現れるものは，$f(q)$ や $g(q)$ という関数を表しているが，$|q'\rangle$ や $|q''\rangle$ のように $|\ \rangle$ 記号のなかに文字 q が入っているものは，(6.34)のような関数を表しているものとする．ほんとうはこのような混乱は避けるべきであろうが，表式を簡単にするために，しばしばこのような記号の使い方をする．

このように，基底が連続変数でラベルされているときも，基底が離散的な場合と本質的にちがっているところはない．単に総和 $\sum$ を積分 $\int$ に読みかえ，Kronecker の δ を Dirac の δ-関数におきかえるだけであとは同じである．

［問題 3］　ベクトル空間 V が，連続変数 $x\,(-\infty\leqq x\leqq\infty)$ でラベルされた基底 $\{|x\rangle\}$ をもっているとする．このとき，V の任意の元 $|\psi\rangle$ を，

$$|\psi\rangle=\int dx\ c(x)|x\rangle$$

のように $|x\rangle\,(-\infty\leqq x\leqq\infty)$ の線型結合として表したときの係数 $c(x)$ のことを，$|\psi\rangle$ を基底 $\{|x\rangle\}$ で展開したときの $|x\rangle$ 成分とよぶ．

(1) $\{|x\rangle\}$が，もし正規直交であれば，すなわち，

$$\langle x'|x''\rangle=\delta(x'-x'')$$

であれば，上の $c(x)$ は $\langle x|\psi\rangle$ に等しいことを示せ．

(2) 同様に，$\{|x\rangle\}$ が正規直交であるとき，V の 2 つの元 $|\psi_1\rangle$，$|\psi_2\rangle$ の内積を，それらの成分で表せ．

［解］　(1) 例題 3 で示したように，$\{|x\rangle\}$ が正規直交基底であれば，

$$1=\int dx\,|x\rangle\langle x| \qquad ⓐ$$

が成り立つ．この両辺を $|\psi\rangle$ に作用させると，

$$|\psi\rangle=\int dx\,|x\rangle\langle x|\psi\rangle$$
$$=\int dx\langle x|\psi\rangle|x\rangle$$

となり，$c(x)=\langle x|\psi\rangle$ が示された．

(2) ⓐの両辺に，左から $\langle\psi_1|$ を，右から $|\psi_2\rangle$ をかけると，

$$\langle\psi_1|\psi_2\rangle=\int dx\langle\psi_1|x\rangle\langle x|\psi_2\rangle$$
$$=\int dx\langle x|\psi_1\rangle^*\langle x|\psi_2\rangle$$

となり，$|\psi_1\rangle$，$|\psi_2\rangle$ に対応する 2 つの関数 $\langle x|\psi_1\rangle$，$\langle x|\psi_2\rangle$ のふつうの内積になっている．　▮

［問題 4］　［問題 3］と同じベクトル空間 V を考える．連続変数 $k\,(-\infty\leqq k\leqq\infty)$ でラベルされたケット・ベクトル $|k\rangle$ を，

$$|k\rangle=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty}dx\ e^{ikx}|x\rangle \qquad ①$$

で定義しよう．

(1) $\{|k\rangle\}$ は V の正規直交基底であることを示せ．

(2) V の任意の元 $|\psi\rangle$ を基底 $\{|x\rangle\}$ で展開したときの成分 $\langle x|\psi\rangle$ と基底 $\{|k\rangle\}$ で展開したときの成分 $\langle k|\psi\rangle$ の間の関係を求めよ．

[解] (1) 定義式①より，

$$\langle k'|k''\rangle=\frac{1}{2\pi}\left(\int dx'\exp(-ik'x')\langle x'|\right)\left(\int dx''\exp(ik''x'')|x''\rangle\right)$$

$$=\frac{1}{2\pi}\int dx'\int dx''\exp(-ik'x'+ik''x'')\langle x'|x''\rangle$$

であるが，$\langle x'|x''\rangle=\delta(x'-x'')$ を使うと，

$$=\frac{1}{2\pi}\int dx'\exp[-i(k'-k'')x']$$

$$=\delta(k'-k'')$$

が得られる．すなわち，$|k\rangle$ は正規直交である．

また，①の逆 Fourier 変換は，

$$|x\rangle=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty}dk\ e^{-ikx}|k\rangle$$

となるから，任意の $|x\rangle$ は $|k\rangle$ の線型結合として表される．よって $|k\rangle$ は完全系をなす．

(2) ①の両辺と $\langle x|$ を縮約することにより，

$$\langle x|k\rangle=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{ikx}$$

を得る．この両辺の随伴をとると，

$$\langle k|x\rangle=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{-ikx}$$

となる．これらを使うと，

$$\langle x|\psi\rangle=\langle x|\left(\int dk|k\rangle\langle k|\right)|\psi\rangle$$

$$=\int dk\langle x|k\rangle\langle k|\psi\rangle$$

$$=\int dk\frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{ikx}\langle k|\psi\rangle,$$

$$\langle k|\psi\rangle=\langle k|\left(\int dx|x\rangle\langle x|\right)|\psi\rangle$$

$$=\int dx\langle k|x\rangle\langle x|\psi\rangle$$

$$=\int dx\frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{-ikx}\langle x|\psi\rangle$$

が得られる．これらは，$\psi(x)=\langle x|\psi\rangle$ と $\tilde{\psi}(k)=\langle k|\psi\rangle$ の間の Fourier 変換および逆変換にほかならない．このことから，Fourier 変換とは，基底 $\{|x\rangle\}$ から基底 $\{|k\rangle\}$ への基底のとりかえと解釈できることがわかるであろう．■

6.4 Schrödinger 描像と Heisenberg 描像

6.1 節および 6.2 節で述べたような量子力学の一般的な枠組みは，ブラ・ケット記号を使っていうと，つぎのようなものであった．各時刻 t における系の状態をケット・ベクトル $|\psi(t)\rangle_{\rm S}$ とすると，その時間発展は，Schrödinger 方程式

$$i\hbar\frac{d}{dt}|\psi(t)\rangle_{\rm S}=\hat{H}|\psi(t)\rangle_{\rm S} \tag{6.38}$$

で表される．また，物理量 O を表す演算子を $\hat{O}_{\rm S}$ とすると，時刻 t におけるその期待値 $\overline{O}(t)$ は，

$$\overline{O}(t)={}_{\rm S}\langle\psi(t)|\hat{O}_{\rm S}|\psi(t)\rangle_{\rm S} \tag{6.39}$$

に等しい．このように，系のもつ物理量を表す演算子 $\hat{O}$ じしんは陽に時間に依存しなくても，状態ベクトル $|\psi(t)\rangle$ が時間とともに変化するので，$\hat{O}$ の期待値も時間とともに変化するのである．このように，物理量を表す演算子を固定しておいて，状態ベクトルの変化として，系の時間発展を表現するやり方を，Schrödinger 描像とよぶ(上の(6.38)や(6.39)で $|\psi(t)\rangle_{\rm S}$ や $\hat{O}_{\rm S}$ のように S をつけて書いたのは，Schrödinger 描像であることを強調するためである)．

ところで，(6.38)は積分すると，

$$|\psi(t)\rangle_{\rm S}=\exp\left(\frac{1}{i\hbar}\hat{H}(t-t_0)\right)|\psi(t_0)\rangle_{\rm S} \tag{6.40}$$

となるから，(6.39)は，

$$\overline{O}(t)={}_{\rm S}\langle\psi(t_0)|\exp\left(-\frac{1}{i\hbar}\hat{H}(t-t_0)\right)\hat{O}_{\rm S}\exp\left(\frac{1}{i\hbar}\hat{H}(t-t_0)\right)|\psi(t_0)\rangle_{\rm S} \tag{6.41}$$

と書ける．これはさらに，つぎのような形に書きなおすことができる．まず，時間 t に依存しないケット・ベクトル $|\psi\rangle_{\rm H}$ と，時間 t に依存する演算子 $\hat{O}_{\rm H}(t)$ を次式で定義する．

$$|\psi\rangle_{\rm H}=|\psi(t_0)\rangle_{\rm S} \tag{6.42 a}$$

$$\hat{O}_{\rm H}(t)=\exp\left(-\frac{1}{i\hbar}\hat{H}(t-t_0)\right)\hat{O}_{\rm S}\exp\left(\frac{1}{i\hbar}\hat{H}(t-t_0)\right) \tag{6.42 b}$$

これらの量を使うと，(6.41)は，

$$\overline{O}(t)={}_{\rm H}\langle\psi|\hat{O}_{\rm H}(t)|\psi\rangle_{\rm H} \tag{6.43}$$

となり，Schrödinger 描像における期待値の式(6.39)と同じ形になる．ここで行った

ことは，けっきょく，(6.41)の時間依存性を，ブラとケットではさまれている演算子におしつけてしまったのである．すなわち，状態ベクトルは時間に依存せずに一定であるが，演算子のほうが(6.42 b)のように時間発展をすると考えても，その演算子を状態ベクトルではさむと，同じ物理量の期待値が得られる．

このように，演算子のほうが時間とともに変化し，状態ベクトルは時間に依存しないとして，時間発展を記述するやり方を，Heisenberg 描像とよぶ．もちろん，2つの描像は，(6.41)における t 依存性を，状態ベクトルにおしつけるか，演算子におしつけるかのちがいだけであり，完全に等価なものである．

Heisenberg 描像における演算子の時間依存性を微分形で書いておこう．(6.42b)の両辺を t で微分すると，

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt}\hat{O}_{\mathrm{H}}(t)&=\left\{\frac{d}{dt}\exp\left(-\frac{1}{i\hbar}\hat{H}(t-t_0)\right)\right\}\hat{O}_{\mathrm{S}}\exp\left(\frac{1}{i\hbar}\hat{H}(t-t_0)\right)\\&\quad+\exp\left(-\frac{1}{i\hbar}\hat{H}(t-t_0)\right)\hat{O}_{\mathrm{S}}\frac{d}{dt}\exp\left(\frac{1}{i\hbar}\hat{H}(t-t_0)\right)\\&=-\frac{1}{i\hbar}\hat{H}\exp\left(-\frac{1}{i\hbar}\hat{H}(t-t_0)\right)\hat{O}_{\mathrm{S}}\exp\left(\frac{1}{i\hbar}\hat{H}(t-t_0)\right)\\&\quad+\exp\left(-\frac{1}{i\hbar}\hat{H}(t-t_0)\right)\hat{O}_{\mathrm{S}}\exp\left(\frac{1}{i\hbar}\hat{H}(t-t_0)\right)\frac{1}{i\hbar}\hat{H}\\&=-\frac{1}{i\hbar}\left[\hat{H},\exp\left(-\frac{1}{i\hbar}\hat{H}(t-t_0)\right)\hat{O}_{\mathrm{S}}\exp\left(\frac{1}{i\hbar}\hat{H}(t-t_0)\right)\right]\end{aligned}\tag{6.44}$$

となる．ここで，[,] は交換子であり，

$$[\hat{A},\hat{B}]=\hat{A}\hat{B}-\hat{B}\hat{A}\tag{6.45}$$

で定義されている．ところが，(6.44)の右辺の交換子のなかの2番目のものは $\hat{O}_{\mathrm{H}}(t)$ じしんであるから，けっきょく，

$$\frac{d}{dt}\hat{O}_{\mathrm{H}}(t)=\frac{1}{i\hbar}[\hat{O}_{\mathrm{H}}(t),\hat{H}]\tag{6.46}$$

が得られる．これは，ハミルトニアン $\hat{H}$ が与えられたときに，いろいろな演算子の時間発展を記述するものであり，Heisenberg 方程式とよばれている((6.42)や(6.46)で，$|\psi\rangle_{\mathrm{H}}$ や $\hat{O}_{\mathrm{H}}$ のように H をつけて書いたのは，Heisenberg 描像であることを示すためである)．

Heisenberg 方程式の形をみると，ハミルトニアンと可換な演算子，とくにハミルトニアンじしんが時間に依存しないことは明らかであろう．実際，$\hat{O}$ を $\hat{H}$ と可換な演算子とすると，(6.46)より Heisenberg 描像での演算子 $\hat{O}$ の時間発展は，

$$\frac{d}{dt}\hat{O}=\frac{1}{i\hbar}[\hat{O},\hat{H}]=0\tag{6.47}$$

となるが，これは $\hat{O}$ が時間に依存しない保存量であることを意味している．ここで，保存量といったのは，そのような演算子の期待値が，任意の状態ベクトルに対して，時間に依存しないからである．

以下に，2 つの描像をまとめておこう．

	Schrödinger 描像	Heisenberg 描像
状態ベクトル $\|\psi\rangle$	$i\hbar\frac{d}{dt}\|\psi\rangle=\hat{H}\|\psi\rangle$ (Schrödinger 方程式)	時間によらない
演算子 $\hat{O}$	時間によらない	$\frac{d}{dt}\hat{O}=\frac{1}{i\hbar}[\hat{O},\hat{H}]$ (Heisenberg 方程式)
物理量の期待値	$\langle\psi\|\hat{O}\|\psi\rangle$	$\langle\psi\|\hat{O}\|\psi\rangle$

(6.48)

6.5　正準交換関係と正準量子化

正準交換関係

第 5 章までで考えたような Schrödinger のおきかえによる量子化を，量子力学の一般的枠組みの立場から考えなおしてみよう．ある系が，古典的な極限では，正準変数 p_i，$q_i\ (i=1,2,\cdots,n)$ およびハミルトニアン $H(p,q)$ で記述されているとき，Schrödinger のおきかえによる量子化とは，6.1 節(1)～(4)のようなものであった．そこでは，状態空間は n 個の変数 $q_i\ (i=1,2,\cdots,n)$ の関数全体のなすベクトル空間であり，位置および運動量の演算子 $\hat{q}_i,\hat{p}_i\ (i=1,2,\cdots,n)$ はつぎのように定義されたエルミート演算子であった．

$$(\hat{q}_i\ \ \psi)(q)=q_i\psi(q) \tag{6.49 a}$$

$$(\hat{p}_i\ \ \psi)(q)=\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial q_i}\psi(q) \tag{6.49 b}$$

よく知られているように，古典力学では位置 q_i と運動量 p_i は対等なものであり，実際，正準変換によってそれらをとりかえることができる．一方，上のような量子化規則を一見すると，位置と運動量の役割が著しく異なっているようにみえる．じつは以下で示すように，このような非対称性は，位置と運動量の演算子を特別な基底で表示したために生じた，見かけ上のものにすぎないことがわかる．

このような事情をわかりやすくするために，上の量子化規則を，抽象的なベクトル空間の言葉に翻訳してみよう．まず，(6.49)からつぎのような交換関係が得られることは明らかであろう．これを正準交換関係とよぶ．

$$[\hat{q}_i, \hat{q}_j]=0 \tag{6.50 a}$$

$$[\hat{p}_i, \hat{p}_j]=0 \tag{6.50 b}$$

$$[\hat{q}_i, \hat{p}_j]=i\hbar\delta_{ij} \tag{6.50 c}$$

ここで，[,] は交換子であり，$[\hat{A}, \hat{B}]=\hat{A}\hat{B}-\hat{B}\hat{A}$ で定義されている．

例題 1 (6.49) から正準交換関係 (6.50) を導け．

解 任意の関数 $\psi(q)$ に対して，

$$\begin{aligned}
[\hat{q}_i, \hat{p}_j]\psi(q) &= \hat{q}_i\hat{p}_j\psi(q)-\hat{p}_j\hat{q}_i\psi(q) \\
&= q_i\left(\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial q_j}\psi(q)\right)-\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial q_j}(q_i\psi(q)) \\
&= q_i\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial q_j}\psi(q)-\frac{\hbar}{i}\left(\frac{\partial q_i}{\partial q_j}\psi(q)+q_i\frac{\partial}{\partial q_j}\psi(q)\right) \\
&= i\hbar\delta_{ij}\psi(q)
\end{aligned}$$

となる．これは，演算子の間の関係式として，(6.50 c) が成り立つことを意味する．他も同様である． ∎

正準交換関係 (6.50) は，古典論における Poisson 括弧と同じ形をしていることに注意しよう．実際，Poisson 括弧を { , } と書くと，古典論ではよく知られているように，

$$\{q_i, q_j\}=0 \tag{6.51 a}$$

$$\{p_i, p_j\}=0 \tag{6.51 b}$$

$$\{q_i, p_j\}=\delta_{ij} \tag{6.51 c}$$

が成り立つが，これは (6.50) と似た形をしている．実際，次の 6.6 節で示すように，量子力学における交換子を $i\hbar$ でわったものは古典極限 ($\hbar\to 0$) において，Poisson 括弧に移行することがわかる．すなわち，

$$\frac{1}{i\hbar}[\ ,\ ] \xrightarrow[\hbar\to 0]{} \{\ ,\ \} \tag{6.52}$$

正準交換関係をみたす演算子の表示

ここまでは，Schrödinger のおきかえ (6.49) によって定義される位置および運動量の演算子が正準交換関係をみたすことを調べたが，(6.49) をいったん忘れて，正準交換関係だけからどの程度のことがいえるかを調べてみよう．すなわち，抽象的なベクトル空間 V の上に，正準交換関係 (6.50) をみたすようなエルミート演算子 $\hat{p}_i, \hat{q}_j$ $(i=1, 2, \cdots, n)$ があるとしたとき，それらが V の上にどのように作用しているかを分析してみよう．そのために，多少天下り的であるが，運動量の演算子 $\hat{p}_i$ $(i=1, 2, \cdots, n)$ から作られるユニタリー演算子

$$\hat{U}(a)=\exp\left(\frac{1}{i\hbar}\sum_{i=1}^{n}a_i\hat{p}_i\right) \tag{6.53}$$

を考えよう．ここで，a_i $(i=1,2,\cdots,n)$ は n 個の実数であり，それらをまとめてベクトルとみなして a と書いた．簡単な計算の結果，

$$\hat{U}(a)^{-1}\hat{q}_i\hat{U}(a)=\hat{q}_i+a_i \qquad (i=1,2,\cdots,n) \tag{6.54 a}$$

$$\hat{U}(a)\hat{U}(b)=\hat{U}(a+b) \tag{6.54 b}$$

が成り立つことがわかる．

例題 2　(6.54) を示せ．

解　一般の演算子，$\hat{A}$ と $\hat{B}$ に対して，

$$e^{\hat{A}}\hat{B}e^{-\hat{A}}=\hat{B}+[\hat{A},\hat{B}]+\frac{1}{2!}[\hat{A}[\hat{A},\hat{B}]]+\cdots \tag{ⓐ}$$

が成り立つ．$\hat{A}=-\frac{1}{i\hbar}\sum_{i=1}^{n}a_i\hat{p}_i$, $\hat{B}=\hat{q}_i$ とすると，(6.50 c) より $[\hat{A},\hat{B}]=a_i$ であるから，ⓐの右辺ははじめの 2 項で切れて，(6.54 a) を得る．(6.54 b) は $\hat{p}_i$ $(i=1,2,\cdots,n)$ がたがいに可換であること (6.50 b) から明らかであろう．■

ところで，$\hat{q}_i$ $(i=1,2,\cdots,n)$ はエルミートであり，(6.50 a) よりたがいに可換であるから，同時に対角化できる．とくに，$\hat{q}_i$ の同時固有状態のうちの 1 つを $|\psi_0\rangle$ とし，その同時固有値を $\hat{q}_i^{(0)}$ としよう．すなわち，

$$\hat{q}_i|\psi_0\rangle=q_i^{(0)}|\psi_0\rangle \qquad (i=1,2,\cdots,n) \tag{6.55}$$

ここでは，状態空間 V をケット・ベクトルの空間とした．つぎに，n 個の変数 q_i' $(i=1,2,\cdots,n)$ でパラメトライズされたケット・ベクトル $|q'\rangle$ を，

$$|q'\rangle=\hat{U}(q'-q^{(0)})|\psi_0\rangle \tag{6.56}$$

として導入しよう．ここで，右辺の $\hat{U}(q'-q^{(0)})$ とは (6.53) の a として $a_i=q_i'-q_i^{(0)}$ $(i=1,2,\cdots,n)$ ととったもののことである．$|q'\rangle$ は $\hat{q}_i$の固有値 q_i' の同時固有ベクトルであることが，(6.54) よりすぐにわかる．すなわち，

$$\hat{q}_i|q'\rangle=q_i'|q'\rangle \qquad (i=1,2,\cdots,n) \tag{6.57}$$

例題 3　(6.57) を示せ．

解　
$$\begin{aligned}
&\hat{q}_i|q'\rangle \\
&=\hat{q}_i\hat{U}(q'-q^{(0)})|\psi_0\rangle && [(6.56)] \\
&=\hat{U}(q'-q^{(0)})\hat{U}(q'-q^{(0)})^{-1}\hat{q}_i\hat{U}(q'-q^{(0)})|\psi_0\rangle \\
&=\hat{U}(q'-q^{(0)})(\hat{q}_i+(q_i'-q_i^{(0)}))|\psi_0\rangle && [(6.54)] \\
&=\hat{U}(q'-q^{(0)})(q_i^{(0)}+(q_i'-q_i^{(0)}))|\psi_0\rangle && [(6.55)] \\
&=q_i'\hat{U}(q'-q^{(0)})|\psi_0\rangle \\
&=q_i'|q'\rangle && [(6.56)]
\end{aligned}$$
■

運動量の演算子 $\hat{p}_i\,(i=1,2,\cdots,n)$ が $|q'\rangle$ にどのように作用しているかを調べるために, (6.53)の $\hat{U}(a)$ を $|q'\rangle$ に作用させてみよう. $|q'\rangle$ の定義(6.56)と(6.54b)より,

$$\begin{aligned}\hat{U}(a)|q'\rangle &= \hat{U}(a)\hat{U}(q'-q^{(0)})|\psi_0\rangle \\ &= \hat{U}(a+q'-q^{(0)})|\psi_0\rangle \\ &= |a+q'\rangle \end{aligned} \tag{6.58}$$

であることがわかる. ここで, a を無限小量 $a_i=\varepsilon_i\,(i=1,2,\cdots,n)$ として, 両辺の ε の1次の項をとりだすと, (6.53)より左辺は, $\dfrac{1}{i\hbar}\sum_{i=1}^{n}\varepsilon_i\hat{p}_i|q'\rangle$ であり, 一方右辺は, $\sum_{i=1}^{n}\varepsilon_i\dfrac{\partial}{\partial q_i'}|q'\rangle$ と書けるから, けっきょく,

$$\hat{p}_i|q'\rangle = i\hbar\frac{\partial}{\partial q_i'}|q'\rangle \qquad (i=1,2,\cdots,n) \tag{6.59}$$

が得られる.

(6.57)および (6.59)から明らかなように, $\{|q'\rangle\}$ ではられる V の部分空間を V_0 とすると, V_0 は $\hat{q}_i, \hat{p}_i\,(i=1,2,\cdots,n)$ の作用に対して閉じている. ここで, 系の自由度は $\hat{q}_i, \hat{p}_i\,(i=1,2,\cdots,n)$ によって完全に決まっており, 状態を指定するためにほかに変数を導入する必要はないと仮定しよう. それは, いいかえると, 上で考えた部分空間 V_0 によって状態が完全に記述されているということであり, $V=V_0$ を意味する[1)].

つぎに, $|q'\rangle$ の間の内積を求めよう. (6.57)に示されているように, $|q'\rangle$ はエルミート演算子 $\hat{q}_i\ (i=1,2,\cdots,n)$ を同時に対角化する基底であるから, 異なる固有値に属するもの $|q'\rangle$ と $|q''\rangle$ $(q'\neq q'')$ は直交している. また, 固有値は連続スペクトルであるから, Dirac の δ 関数を使って,

$$\langle q'|q''\rangle = f(q')\delta^{(n)}(q'-q'') \tag{6.60}$$

と書けるはずである. ここで, $f(q')$ は $|q'\rangle$ の規格化を決める因子である. ところで, (6.58)に示されているように, 異なる q' の値に対する $|q'\rangle$ はユニタリー変換で結びついているから, そのノルムは q' に依存しないはずである. すなわち, $f(q')$ は q'

1) これは, 数学的にいうと, V が演算子 $\hat{q}_i, \hat{p}_i\ (i=1,2,\cdots,n)$ に関して既約であるということである. V が既約でなければ, V_0 の直交補空間に対して上の議論を繰り返すことにより, V は V_0 と同型なもののいくつかの直和に分解することがわかる.

$$V=V_0\oplus V_1\oplus V_2\oplus\cdots,\quad V_0\simeq V_1\simeq V_2\simeq\cdots$$

この場合, 状態を指定するためには, $\hat{q}_i$ の固有値を指定しただけでは不十分であり, どの V_i に属するかを指定する量子数が必要となる.

によらない定数であることがわかる．その定数を1とするように $|q'\rangle$ の規格化を選ぶと，

$$\langle q'|q''\rangle=\delta^{(n)}(q'-q'') \tag{6.61}$$

を得る(196ページ［問題5］参照)．

けっきょく，つぎのことがわかった．

正準交換関係(6.50)をみたす力学変数 $\hat{q}_i, \hat{p}_i\ (i=1,2,\cdots,n)$ で完全に記述されている系があったとする．その状態空間の正規直交基底として，$\hat{q}_i\ (i=1,2,\cdots,n)$ を同時に対角化するもの $\{|q'\rangle\}$ がとれて，

$$\hat{q}_i|q'\rangle=q_i'|q'\rangle \tag{6.57}$$

$$\hat{p}_i|q'\rangle=i\hbar\frac{\partial}{\partial q_i'}|q'\rangle \tag{6.59}$$

$$\langle q'|q''\rangle=\delta^{(n)}(q'-q'') \tag{6.61}$$

が成り立つ．

このような基底 $\{|q'\rangle\}$ によって状態ベクトルを表示することを，**座標表示**または，***q*-表示**という．つぎの例題に示すように，Schrödinger のおきかえ(6.49)は，座標表示における位置および運動量の演算子にほかならないことがわかる．

例題4　状態ベクトル $|\psi\rangle$ を座標表示したものを $\psi(q)$ とする．すなわち，$\psi(q)=\langle q|\psi\rangle$ とする．このとき，位置および運動量の演算子はどのように表示されるか．2つの状態ベクトルの内積はどう書けるか．

解　(i) (6.57)の随伴をとると，

$$\langle q'|\hat{q}_i=q_i'\langle q'|$$

となる．この両辺と $|\psi\rangle$ を縮約すると，

$$\langle q'|\hat{q}_i|\psi\rangle=q_i'\langle q'|\psi\rangle=q_i'\psi(q')$$

を得る．これは(6.49 a)を意味している．

(ii) (6.59)の随伴をとると，

$$\langle q'|\hat{p}_i=-i\hbar\frac{\partial}{\partial q_i'}\langle q'|$$

となる．この両辺を $|\psi\rangle$ と縮約すると，

$$\langle q'|\hat{p}_i|\psi\rangle=-i\hbar\frac{\partial}{\partial q'}\langle q'|\psi\rangle=\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial q'}\psi(q')$$

を得る．これは，(6.49 b)を意味している．

(iii) (6.61)は，

$$1=\int d^nq'\,|q'\rangle\langle q'|$$

と同じ内容である．そうすると，2つの状態ベクトル $|\psi_1\rangle$, $|\psi_2\rangle$ に対して，

$$\langle\psi_1|\psi_2\rangle=\langle\psi_1|\left(\int d^n q'\,|q'\rangle\langle q'|\right)|\psi_2\rangle$$
$$=\int d^n q'\langle\psi_1|q'\rangle\langle q'|\psi_2\rangle$$
$$=\int d^n q'\langle q'|\psi_1\rangle^*\langle q'|\psi_2\rangle$$
$$=\int d^n q'\,\psi_1(q')^*\,\psi_2(q')$$

となり，通常の関数空間における内積と一致している． ■

運動量表示

座標表示では，位置の演算子 $\hat{q}_i$ $(i=1,2,\cdots,n)$ を同時対角化する基底を考えた．ところが，正準交換関係(6.50)は，$\hat{q}_i$ と $\hat{p}_i$ を入れかえて，形式的に i を $-i$ とすれば，不変であるから，運動量の演算子 $\hat{p}_i$ $(i=1,2,\cdots,n)$ を同時対角化するような基底 $\{|p'\rangle\}$ があって，

$$\hat{p}_i|p'\rangle=p_i'|p'\rangle \tag{6.62}$$

$$\hat{q}_i|p'\rangle=-i\hbar\frac{\partial}{\partial p_i'}|p'\rangle \tag{6.63}$$

$$\langle p'|p''\rangle=\delta^{(n)}(p'-p'') \tag{6.64}$$

が成り立っているはずである．ここで，(6.62)，(6.63)，(6.64)はそれぞれ，(6.57)，(6.59)，(6.61)で形式的に q と p を書きかえて，i を $-i$ とおいたものである．

実際，$\{|q'\rangle\}$ の線型結合として，

$$|p'\rangle=(2\pi\hbar)^{-\frac{n}{2}}\int d^n q'\exp\left(\frac{i}{\hbar}\sum_{i=1}^{n}p_i'q_i'\right)|q'\rangle \tag{6.65}$$

の形のものをとると，たしかに(6.62)から(6.64)がみたされていることが，つぎの例題のようにして示される．

例題 5 (6.65)で定義された $|p'\rangle$ は，(6.62)から(6.64)をみたしていることを示せ．

解 (i) $\hat{p}_i|p'\rangle$

$$=(2\pi\hbar)^{-\frac{n}{2}}\int d^n q'\exp\left(\frac{i}{\hbar}\sum_{i=1}^{n}p_i'q_i'\right)i\hbar\frac{\partial}{\partial q_i'}|q'\rangle \qquad [(6.59)]$$

$$=(2\pi\hbar)^{-\frac{n}{2}}\int d^n q'\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial q_i'}\exp\left(\frac{i}{\hbar}\sum p_i'q_i'\right)\right)|q'\rangle \qquad [部分積分]$$

$$=p_i'|p'\rangle$$

(ii) $\hat{q}_i|p'\rangle$

$$=(2\pi\hbar)^{-\frac{n}{2}}\int d^nq'\exp\left(\frac{i}{\hbar}\sum p_i'q_i'\right)q_i'\,|q'\rangle \qquad [(6.57)]$$

$$=(2\pi\hbar)^{-\frac{n}{2}}\int d^nq'\left(\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial p_i'}\exp\left(\frac{i}{\hbar}\sum p_i'q_i'\right)\right)|q'\rangle$$

$$=\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial p_i'}|p'\rangle$$

(iii) (6.65)の随伴をとると，

$$\langle p'|=(2\pi\hbar)^{-\frac{n}{2}}\int d^nq'\exp\left(-\frac{i}{\hbar}\sum p_i'q_i'\right)\langle q'|$$

となる．これと(6.65)で p'，q' を p''，q'' におきかえたものを縮約すると，

$$\langle p'|p''\rangle=(2\pi\hbar)^{-n}\int d^nq'\int d^nq''\exp\left(-\frac{i}{\hbar}\left(\sum p_i'q_i'-\sum p_i''q_i''\right)\right)\langle q'|q''\rangle$$

$$=(2\pi\hbar)^{-n}\int d^nq'\exp\left(-\frac{i}{\hbar}\sum(p_i'-p_i'')q_i'\right) \qquad [(6.61)]$$

$$=\delta^{(n)}(p'-p'') \qquad \blacksquare$$

ここで，状態ベクトル $|p'\rangle$ は，運動量の演算子 $\hat{p}_i\ (i=1, 2, \cdots, n)$ の同時固有状態であり，平面波の状態に対応していることに注意しよう．実際，(6.65)の両辺と $\langle q'|$ を縮約することにより，$|p'\rangle$ の座標表示を求めると，

$$\langle q'|p'\rangle=(2\pi\hbar)^{-\frac{n}{2}}\exp\left(\frac{i}{\hbar}\sum_{i=1}^{n}p_i'q_i'\right) \qquad (6.66)$$

となり，たしかに平面波の波動関数になっている．

このような基底 $\{|p'\rangle\}$ によって状態ベクトルを表示することを，**運動量表示**または **p-表示**という．座標表示の場合の表式(6.49)で，q と p を入れかえて形式的に i を $-i$ にすることにより，運動量表示における $\hat{q}_i$ と $\hat{p}_i$ はつぎのような微分演算子であることがわかる．

$$(\hat{p}_i\ \tilde{\psi})(p)=p_i\tilde{\psi}(p) \qquad (6.67\,\mathrm{a})$$

$$(\hat{q}_i\ \tilde{\psi})(p)=i\hbar\frac{\partial}{\partial p_i}\tilde{\psi}(p) \qquad (6.67\,\mathrm{b})$$

ここで，$\tilde{\psi}(p)$ は運動量表示の波動関数 $\langle p|\psi\rangle$ である．

最後に，座標表示と運動量表示の間の関係を調べておこう．(6.66)およびその随伴

$$\langle p'|q'\rangle=(2\pi\hbar)^{-\frac{n}{2}}\exp\left(-\frac{i}{\hbar}\sum_{i=1}^{n}p_i'q_i'\right) \qquad (6.68)$$

を使うと，座標表示と運動量表示がつぎの関係でつながっていることがわかる．

$$\langle q'|\psi\rangle=\int d^np'\langle q'|p'\rangle\langle p'|\psi\rangle \qquad (6.69\,\mathrm{a})$$

$$= \int d^n p' (2\pi\hbar)^{-\frac{n}{2}} \exp\left(\frac{i}{\hbar}\sum_{i=1}^{n} p_i' q_i'\right) \langle p' \mid \psi \rangle$$

$$\langle p' \mid \psi \rangle = \int d^n q' \langle p' \mid q' \rangle \langle q' \mid \psi \rangle \qquad (6.69\,\mathrm{b})$$

$$= \int d^n q' (2\pi\hbar)^{-\frac{n}{2}} \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\sum_{i=1}^{n} p_i' q_i'\right) \langle q' \mid \psi \rangle$$

これは，$\psi(q') = \langle q' \mid \psi \rangle$ と $\tilde{\psi}(p') = \langle p' \mid \psi \rangle$ の間の Fourier 変換にほかならない．いいかえると，Fourier 変換とは，$\hat{q}_i$ を対角化する基底から，$\hat{p}_i$ を対角化する基底へのユニタリー変換であったわけである．

正準量子化

以上の議論でわかったように，Schrödinger のおきかえ $p_i \mapsto \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial q_i}$ による量子化は，正準交換関係を座標表示で表現したものにほかならない．いいかえると，正準交換関係とは量子化の手続きを基底のとり方に依存しないように表現したものであるといえる．内容的には Schrödinger のおきかえと等価であるが，基底によらない定式化をしておくと便利であるから，量子化の手続きを以下のようにまとめておこう．このような手続きを通常，正準量子化とよんでいる．

正準量子化の手続き

(1) 考えている系を正準形式で表す．その正準変数を $q_i, p_i\ (i=1, 2, \cdots, n)$ とし，ハミルトニアンを $H(p, q)$ とする．

(2) 正準変数 p_i と q_i を量子化した演算子を $\hat{p}_i, \hat{q}_i$ とし，その間に正準交換関係

$$[\hat{q}_i, \hat{p}_j] = i\hbar\delta_{ij}, \quad [\hat{q}_i, \hat{q}_j] = 0, \quad [\hat{p}_i, \hat{p}_j] = 0$$

をおく．

(3) 量子力学的なハミルトニアン $\hat{H}$ をエルミート演算子として，

$$\hat{H} = H(\hat{p}, \hat{q})$$

で定義する．他の物理量も必要ならば同様に古典的な表式の p，q を $\hat{p}, \hat{q}$ でおきかえてつくる．

(4) 系の時間発展は，Schrödinger 描像ならば Schrödinger 方程式で，Heisenberg 描像ならば Heisenberg 方程式で表す．

正準量子化は，内容的には Schrödinger のおきかえと同じものであり，古典的なラグランジアンが与えられたときに，対応する量子論を作りあげる規則である．しかしながら，古典力学的な極限におけるラグランジアンから正準量子化によって構成された量子論が，ほんとうに正しく系を記述しているとは限らないことに注意しよう．たとえば，系が古典力学的極限ではみえなくなってしまうような自由度をもっ

ていることもありうる．実際，第7章でくわしく議論するように，電子やその他のいろいろな粒子は，スピンの自由度をもっている．そのような自由度も含めて表現するためには，位置と運動量に対する正準交換関係だけでは不十分であり，スピンの演算子を導入しなくてはならない．また，5.1節で調べたように，ハミルトニアン $\hat{H}$ は p_i と q_i の関数 $H(p,q)$ に可換でない量 $\hat{p}_i, \hat{q}_i$ を代入したものだから，一意的には定義されていない．このような不定性を除くためには，対称性その他の物理的考察が必要であったことを思い出そう．

［問題5］ $|q'\rangle$ の間の内積(6.61)を本文とは別の方法で導いてみよう．出発点の仮定として，

$$\hat{q}_i|q'\rangle = q_i'|q'\rangle \quad (i=1,2,\cdots,n) \tag{6.57}$$

$$\hat{p}_i|q'\rangle = i\hbar\frac{\partial}{\partial q_i'}|q'\rangle \quad (i=1,2,\cdots,n) \tag{6.59}$$

をとる．

(1) (6.59)で $\hat{p}_i$ がエルミートであることから，$\langle q'|q''\rangle$ は $q_i'-q_i''$ $(i=1,2,\cdots,n)$ の関数であること，すなわち，

$$\langle q'|q''\rangle = \rho(q'-q'')$$

と書けることを示せ．ここで，ρ は n 変数の超関数とする．

(2) (6.57)で $\hat{q}_i$ がエルミートであることから $\rho(q-q')$ は δ 関数 $\delta^{(n)}(q-q')$ の定数倍であることを示せ．

［解］ (1) (6.59)の両辺で，q' を q'' に書きかえたものと $\langle q'|$ の縮約をとると，

$$\langle q'|\hat{p}_i|q''\rangle = i\hbar\frac{\partial}{\partial q_i''}\langle q'|q''\rangle \tag{ⓐ}$$

を得る．この両辺の随伴をとって，q' と q'' を入れかえると，

$$\langle q'|\hat{p}_i|q''\rangle = -i\hbar\frac{\partial}{\partial q_i'}\langle q'|q''\rangle \tag{ⓑ}$$

となる．ここで，$\hat{p}_i$ がエルミートであることを使った．

ⓐとⓑより，

$$\left(\frac{\partial}{\partial q_i'}+\frac{\partial}{\partial q_i''}\right)\langle q'|q''\rangle = 0 \quad (i=1,2,\cdots,n)$$

を得る．これは，$\langle q'|q''\rangle$ が $q_i'-q_i''$ $(i=1,2,\cdots,n)$ のみの関数であること

$$\langle q'|q''\rangle = \rho(q'-q'') \tag{ⓒ}$$

を示している．

(2) (6.57)の両辺で，q' を q'' に書きかえたものと $\langle q'|$ の縮約をとると，

$$\langle q'|\hat{q}_i|q''\rangle = q_i''\langle q'|q''\rangle \tag{ⓓ}$$

を得る．この両辺の随伴をとって q' と q'' を入れかえると，

$$\langle q'|\hat{q}_i|q''\rangle = q_i'\langle q'|q''\rangle \qquad ⓔ$$

となる．ここで，$\hat{q}_i$ がエルミートであることを使った．ⓓとⓔより，

$$(q_i'-q_i'')\langle q'|q''\rangle = 0 \quad (i=1,2,\cdots,n)$$

を得るが，これにⓒを代入すると，

$$(q_i'-q_i'')\rho(q'-q'')=0 \quad (i=1,2,\cdots,n) \qquad ⓕ$$

となる．ところで，一般に，$xf(x)=0$ をみたす超関数 $f(x)$ は δ 関数 $\delta(x)$ の定数倍であるから，ⓕは，

$$\rho(q'-q'')=c\delta^{(n)}(q'-q'') \quad (c \text{ は定数})$$

を意味している． ▮

[問題 6] 座標表示の基底 $\{|q'\rangle\}$ は，定数倍を除いて一意的であることを示せ．すなわち，2 組の基底 $\{|q';1\rangle\}$ および $\{|q';2\rangle\}$ が，どちらも，

$$\hat{q}_i|q';l\rangle = q_i'|q';l\rangle \qquad (l=1,2) \qquad ①$$

$$\hat{p}_i|q';l\rangle = i\hbar\frac{\partial}{\partial q_i'}|q';l\rangle \qquad (l=1,2) \qquad ②$$

をみたしているとき，定数 c があって，

$$|q';1\rangle = c|q';2\rangle$$

となることを示せ．

[解] $|q';1\rangle$ も $|q';2\rangle$ も $\hat{q}_i$ $(i=1,2,\cdots,n)$ の同時固有状態であり，縮退はないから，比例しているはずである．すなわち，

$$|q';1\rangle = c(q')|q';2\rangle \qquad ⓐ$$

$\hat{p}_i$ をこの両辺に作用させて，②を使うと，

$$\frac{\partial}{\partial q_i'}|q';1\rangle = c(q')\frac{\partial}{\partial q_i'}|q';2\rangle \qquad ⓑ$$

を得る．

一方，ⓐの両辺を q_i' で微分すると，

$$\frac{\partial}{\partial q_i'}|q';1\rangle = \frac{\partial c(q')}{\partial q_i'}|q';2\rangle + c(q')\frac{\partial}{\partial q_i'}|q';2\rangle \qquad ⓒ$$

となる．ⓑとⓒを比べると，$\dfrac{\partial c(q')}{\partial q_i'}=0$ であること，すなわち，$c(q')$ は q' に依存しない定数であることがわかる． ▮

[問題 7] ハミルトニアンが，

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^{n}\frac{1}{2m_i}\hat{p}_i^2 + V(\hat{q}_1,\cdots,\hat{q}_n)$$

で与えられるとする．そのとき，$\hat{q}_i, \hat{p}_i\,(i=1,2,\cdots,n)$ に対する Heisenberg 方程式を書け．

[解]

$$\frac{d}{dt}\hat{q}_i=\frac{1}{i\hbar}[\hat{q}_i,\hat{H}]$$
$$=\frac{1}{i\hbar}\left[\hat{q}_i\ ,\ \sum_{j=1}^{n}\frac{1}{2m_j}\hat{p}_j{}^2+V(\hat{q}_1,\cdots,\hat{q}_n)\right]$$
$$=\frac{1}{m_i}\hat{p}_i$$
$$\frac{d}{dt}\hat{p}_i=\frac{1}{i\hbar}[\hat{p}_i,\hat{H}]$$
$$=\frac{1}{i\hbar}\left[\hat{p}_i\ ,\ \sum_{j=1}^{n}\frac{1}{2m_j}\hat{p}_j{}^2+V(\hat{q}_1,\cdots,\hat{q}_n)\right]$$
$$=-\frac{\partial}{\partial q_i}V(\hat{q}_1,\cdots,\hat{q}_n)$$

となり，古典的な正準方程式と同じ形である．　∎

6.6　交換子と Poisson 括弧

6.5 節の(6.52)でも述べたように，正準交換関係と Heisenberg 方程式を，

$$\frac{1}{i\hbar}[\hat{q}_i,\hat{q}_j]=0 \tag{6.70 a}$$

$$\frac{1}{i\hbar}[\hat{p}_i,\hat{p}_j]=0 \tag{6.70 b}$$

$$\frac{1}{i\hbar}[\hat{q}_i,\hat{p}_j]=\delta_{ij} \tag{6.70 c}$$

$$\frac{d}{dt}\hat{O}=\frac{1}{i\hbar}[\hat{O},\hat{H}] \tag{6.71}$$

と書くと，交換子を $i\hbar$ でわったものは古典力学の Poisson 括弧と非常に似たものであることがわかる．実際，上式で $\frac{1}{i\hbar}[\ \ ,\ \ ]$ を形式的に Poisson 括弧 $\{\ \ ,\ \ \}$ に読みかえたものが古典力学にほかならない．このような関係は単なる偶然ではなくて，量子力学の古典力学的極限を考えると，たしかに交換子を $i\hbar$ でわったものは Poisson 括弧に移行することを示そう．

議論を具体的に進めるために，演算子としては，位置 $\hat{q}_i$，運動量 $\hat{p}_i$，ハミルトニアン $H=\hat{H}(\hat{p},\hat{q})$ のように $\hat{q}_i$ と $\hat{p}_i\,(i=1,2,\cdots,n)$ の具体的な関数として書けているものを考える．また，その関数形は陽に Planck 定数 $\hbar$ を含んでいないとしよう．たとえば，ある演算子 $\hat{A}$ が，

$$\hat{A}=\sum_{i=1}^{n}\left(\frac{1}{2}\hat{p}_i^{\,2}+\hat{p}_i f_i(\hat{q})+g_i(\hat{q})\hat{p}_i\right)+V(\hat{q}) \tag{6.72}$$

のような形であるとしたとき，f_i, g_i, V は $\hbar$ に依存していないとする．

このような演算子 $\hat{O}$ の表式のなかで，$\hat{q}_i, \hat{p}_i\ (i=1,2,\cdots,n)$ を形式的に古典的な変数 $q_i, p_i\ (i=1,2,\cdots,n)$ でおきかえたものを $\hat{O}$ の古典極限とよび，$(\hat{O})_{\rm cl}$ と書こう．たとえば，上の $\hat{A}$ の古典極限 $(\hat{A})_{\rm cl}$ は，

$$(\hat{A})_{\rm cl}=\sum_{i=1}^{n}\left(\frac{1}{2}p_i^{\,2}+p_i f_i(q)+g_i(q)p_i\right)+V(q) \tag{6.73}$$

で与えられる．ここで導入した古典極限は，演算子の期待値の古典的な極限にほかならないことに注意しよう．実際，第2章では，適当に局在化した波束は，古典力学に従う粒子のようにふるまうことをみた．そこでは座標および運動量の平均値が q_i, p_i であり，そのひろがり $\Delta q_i, \Delta p_i$ が不確定性関係で許される限界 $(\Delta q_i \Delta p_i \sim \hbar)$ に比べて，大きすぎることはないような波束の状態を考えた．明らかに，そのような状態における演算子 $\hat{O}$ の期待値は，近似的に $(\hat{O})_{\rm cl}$ で与えられる．

以上のように考えると，本節のはじめに述べたような，交換子と Poisson 括弧の類似性は，

$$\left(\frac{1}{i\hbar}[\hat{O}_1, \hat{O}_2]\right)_{\rm cl}=\{(\hat{O}_1)_{\rm cl}, (\hat{O}_2)_{\rm cl}\} \tag{6.74}$$

を主張していたのだということがわかるだろう．すなわち，2つの演算子 $\hat{O}_1$，$\hat{O}_2$ の交換子を $i\hbar$ でわったものの古典極限は，それぞれで先に古典極限をとってしまったもの $(\hat{O}_1)_{\rm cl}$ と $(\hat{O}_2)_{\rm cl}$ の Poisson 括弧に等しい．

(6.74)が，陽に $\hbar$ を含まないような演算子 $\hat{O}_1$ および $\hat{O}_2$ に対して成り立っていることを示すのは難しくはない．しかしながら，それをくわしく述べてもあまり役立たないと思われるので，つぎの例題にいくつかの具体例をあげるだけにしておこう．

例題　$\hat{O}_1, \hat{O}_2$ がつぎのような場合，(6.74)が成り立つことをチェックせよ．ただし，自由度 $n=1$ とする．また，$\hat{H}=\dfrac{\hat{p}^2}{2m}+V(\hat{q})$ とする．

(1) $\hat{O}_1=\hat{q}, \hat{O}_2=\hat{p}$

(2) i) $\hat{O}_1=\hat{q}, \hat{O}_2=\hat{H}$

　ii) $\hat{O}_1=\hat{p}, \hat{O}_2=\hat{H}$

(3) $\hat{O}_1=U(\hat{q}), \hat{O}_2=\hat{H}$．ただし，$U$ は任意の関数とする．

解　(1) 明らかに，

$$(\hat{q})_{\rm cl}=q, \qquad (\hat{p})_{\rm cl}=p$$

であるから，(6.74)の両辺は1であり，成り立っている．

(2) $(\hat{H})_{\rm cl}=\dfrac{p^2}{2m}+V(q)$である．

(i) $\dfrac{1}{i\hbar}[\hat{q},\ \hat{H}]=\dfrac{1}{i\hbar}\left[\hat{q},\ \dfrac{\hat{p}^2}{2m}+V(\hat{q})\right]=\dfrac{\hat{p}}{m}$ より，(6.74)の(左辺)$=\left(\dfrac{\hat{p}}{m}\right)_{\rm cl}=\dfrac{p}{m}$ である．一方，

(6.74) の(右辺)$=\left\{q,\ \dfrac{p^2}{2m}+V(q)\right\}=\dfrac{p}{m}$ であり，たしかに(6.74)は成り立っている．

(ii) $\dfrac{1}{i\hbar}[\hat{p},\ \hat{H}]=\dfrac{1}{i\hbar}\left[\hat{p},\ \dfrac{\hat{p}^2}{2m}+V(\hat{q})\right]=-V'(\hat{q})$ より，(6.74) の(左辺)$=(-V'(\hat{q}))_{\rm cl}=-V'(q)$ となる．

一方，(6.74)の(右辺)$=\left\{p,\ \dfrac{p^2}{2m}+V(q)\right\}=-V'(q)$ だから，やはり(6.74)は成り立っている．

(3)
$$\frac{1}{i\hbar}[U(\hat{q}),\hat{H}]=\frac{1}{i\hbar}\left[U(\hat{q}),\ \frac{\hat{p}^2}{2m}+V(\hat{q})\right]$$
$$=\frac{1}{2m}(U'(\hat{q})\hat{p}+\hat{p}U'(\hat{q}))$$

より，

$$(6.74)の(左辺)=\frac{1}{2m}(U'(\hat{q})\hat{p}+\hat{p}U'(\hat{q}))_{\rm cl}$$
$$=\frac{1}{m}U'(q)p$$

となる．一方，(6.74)の(右辺)$=\left\{U(q),\ \dfrac{p^2}{2m}+V(q)\right\}$
$$=\frac{1}{m}U'(q)p$$

だから，たしかに(6.74)は成り立っている．　∎

以上のようにして，量子力学の交換子を $i\hbar$ でわったものは，古典力学的極限で Poisson 括弧に移行することがわかった．これを逆にみると，けっきょく，正準量子化とは，古典力学の Poisson 括弧{　,　}を形式的に $\dfrac{1}{i\hbar}$[　,　]でおきかえる手続きであったといえる．

［問題 8］　交換子[　,　]も Poisson 括弧{　,　}もつぎの性質をみたすことを示せ(具体的には，交換子の場合を書いた)．

(1) $[A,B]=-[B,A]$

(2) $[A,B]$ は，A,B について双線形．

(3) $[A, BC]=B[A, C]+[A, B]C$

(4) Jacobi 律，すなわち，

$[A,[B, C]]+[B,[C, A]]+[C,[A, B]]=0$

［解］　交換子の定義式 $[A, B]=AB-BA$ および Poisson 括弧の定義式 $\{A, B\}=\sum_{i=1}^{n}\left(\frac{\partial A}{\partial q_i}\frac{\partial B}{\partial p_i}-\frac{\partial A}{\partial p_i}\frac{\partial B}{\partial q_i}\right)$ よりすぐに確かめられる．　▮

6.7　調和振動子と生成・消滅演算子

生成・消滅演算子

本章で導入した記法の応用として，調和振動子を考えてみよう．まず，1 次元の場合の，

$$H=\frac{\hat{p}^2}{2m}+\frac{m}{2}\omega^2\hat{q}^2 \tag{6.75}$$

を考える．ここで，$\hat{q}$ と $\hat{p}$ はつぎの正準交換関係をみたす．

$$[\hat{q}, \hat{p}]=i\hbar \tag{6.76}$$

(いまは 1 自由度なので，$[\hat{q}, \hat{q}]=0$，$[\hat{p}, \hat{p}]=0$ は自明である)

ここで，消滅演算子 $\hat{a}$ と生成演算子 $\hat{a}^\dagger$ を次式で定義しよう．もちろん，$\hat{a}$ と $\hat{a}^\dagger$ はたがいにエルミート共役である．

$$\hat{a}=\frac{1}{\sqrt{2\hbar}}\left(\sqrt{m\omega}\,\hat{q}+i\frac{1}{\sqrt{m\omega}}\hat{p}\right) \tag{6.77 a}$$

$$\hat{a}^\dagger=\frac{1}{\sqrt{2\hbar}}\left(\sqrt{m\omega}\,\hat{q}-i\frac{1}{\sqrt{m\omega}}\hat{p}\right) \tag{6.77 b}$$

また，数演算子とよばれているもの $\hat{n}$ を次式で定義する．

$$\hat{n}=\hat{a}^\dagger\hat{a} \tag{6.78}$$

このとき，つぎの例題に示すように交換関係，

$$[a, a^\dagger]=1 \tag{6.79}$$

$$[\hat{n}, \hat{a}]=-\hat{a} \tag{6.80 a}$$

$$[\hat{n}, \hat{a}^\dagger]=\hat{a}^\dagger \tag{6.80 b}$$

が成り立ち，また，ハミルトニアン $\hat{H}$ はつぎのように表される．

$$\hat{H}=\hbar\omega\left(\hat{a}^\dagger\hat{a}+\frac{1}{2}\right)=\hbar\omega\left(\hat{n}+\frac{1}{2}\right) \tag{6.81}$$

例題 1　(6.79)，(6.80)，(6.81) を示せ．

解　(i) $\hat{a}$ および $\hat{a}^\dagger$ の定義式より，

$$[\hat{a}, \hat{a}^\dagger]=\frac{1}{2\hbar}\left[\sqrt{m\omega}\,\hat{q}+i\frac{1}{\sqrt{m\omega}}\hat{p},\ \sqrt{m\omega}\,\hat{q}-i\frac{1}{\sqrt{m\omega}}\hat{p}\right]$$

$$=\frac{1}{2\hbar}\{[\hat{q},-i\hat{p}]+[i\hat{p},\hat{q}]\}=1$$

より，(6.79)が得られる．

(ii) $[\hat{n},\hat{a}]=[\hat{a}^\dagger\hat{a},\hat{a}]=\hat{a}^\dagger[\hat{a},\hat{a}]+[\hat{a}^\dagger,\hat{a}]\hat{a}$

$=-\hat{a},$

$[\hat{n},\hat{a}^\dagger]=[\hat{a}^\dagger\hat{a},\hat{a}^\dagger]=\hat{a}^\dagger[\hat{a},\hat{a}^\dagger]+[\hat{a}^\dagger,\hat{a}^\dagger]\hat{a}$

$=\hat{a}^\dagger$

より，(6.80)を得る．

(iii) $\hat{a}^\dagger\hat{a}=\frac{1}{2\hbar}\left(\sqrt{m\omega}\,\hat{q}-i\frac{1}{\sqrt{m\omega}}\hat{p}\right)\left(\sqrt{m\omega}\,\hat{q}+i\frac{1}{\sqrt{m\omega}}\hat{p}\right)$

$=\frac{1}{2\hbar}\left(m\omega\hat{q}^2+\frac{1}{m\omega}\hat{p}^2+i[\hat{q},\hat{p}]\right)$

$=\frac{1}{\hbar\omega}\hat{H}-\frac{1}{2}$

より(6.81)は明らか．　■

生成・消滅演算子の状態空間への作用

つぎに，このような演算子 $\hat{a},\hat{a}^\dagger$ が状態空間にどのように作用しているかを，具体的に書きくだすことを考えよう．まず，数演算子 $\hat{n}$ に対するつぎの性質を確認しておこう．

例題2 つぎのことを示せ．

(1) 数演算子 $\hat{n}$ は，非負定値エルミートである．すなわち，$\hat{n}$ の固有値はすべて正か0である．

(2) $\hat{a}$ は $\hat{n}$ の固有値を1だけ減少させ，$\hat{a}^\dagger$ は $\hat{n}$ の固有値を1だけ増加させる．すなわち，$|\lambda\rangle$ が，

$$\hat{n}|\lambda\rangle=\lambda|\lambda\rangle$$

をみたせば，

(i) $\hat{n}(\hat{a}|\lambda\rangle)=(\lambda-1)(\hat{a}|\lambda\rangle)$

(ii) $\hat{n}(\hat{a}^\dagger|\lambda\rangle)=(\lambda+1)(\hat{a}^\dagger|\lambda\rangle)$

をみたす．

解 (1) $\hat{n}=\hat{a}^\dagger\hat{a}$ だから，$\hat{n}^\dagger=(\hat{a}^\dagger\hat{a})^\dagger=\hat{a}^\dagger\hat{a}=\hat{n}$ であり，$\hat{n}$ はエルミートである．任意の状態ベクトル $|\psi\rangle$ に対して，$\hat{n}$ の期待値は，

$$\langle\psi|\hat{n}|\psi\rangle=\langle\psi|\hat{a}^\dagger\hat{a}|\psi\rangle$$

となるが，これは $\hat{a}|\psi\rangle$ というベクトルのノルムであるから，正か0である．よって $\hat{n}$ は非負定値であり，固有値はすべて正か0である．

(2) (i) (6.80 a) より，

$$\hat{n}\hat{a}=\hat{a}\hat{n}-\hat{a}$$

となる．両辺を $|\lambda\rangle$ に作用させると，

$$\hat{n}(\hat{a}|\lambda\rangle)=\hat{a}\hat{n}|\lambda\rangle-\hat{a}|\lambda\rangle=(\lambda-1)\hat{a}|\lambda\rangle$$

が得られる．

(ii)も同様である．■

上に示したように，$\hat{n}$ は非負定値エルミートであり，固有値はすべて正かゼロである．$\hat{n}$ の最小の固有値に対応する固有ベクトルを1つとりだし，$|0\rangle$ と書こう．ところが，やはり上の例題に示したように，$\hat{a}$ は $\hat{n}$ の固有値を1だけ減少させる演算子であるから，$\hat{a}|0\rangle$ がゼロ・ベクトルでなければ，$|0\rangle$ が最小固有値をもつことに矛盾する．すなわち，$|0\rangle$ は，

$$\hat{a}|0\rangle=0 \tag{6.82}$$

をみたすことがわかった．以下，$|0\rangle$ は規格化条件

$$\langle 0|0\rangle=1 \tag{6.83}$$

をみたしているとする．(6.82) からすぐわかるように，

$$\hat{n}|0\rangle=\hat{a}^{\dagger}\hat{a}|0\rangle=0 \tag{6.84}$$

であるから，$|0\rangle$ は $\hat{n}$ の固有値0の固有ベクトルであったことがわかる．

つぎに，$|0\rangle$ に生成演算子 $\hat{a}^{\dagger}$ を n 回作用させて，適当な因子をかけたものを $|n\rangle$ としよう．すなわち，

$$|n\rangle=\frac{1}{\sqrt{n!}}(\hat{a}^{\dagger})^{n}|0\rangle \quad (n=0,1,2,\cdots) \tag{6.85}$$

つぎの例題で示すように，このようにして定義された $|n\rangle$ は，

$$\hat{n}|n\rangle=n|n\rangle \tag{6.86}$$

$$\hat{a}|n\rangle=\sqrt{n}\,|n-1\rangle \tag{6.87 a}$$

$$\hat{a}^{\dagger}|n\rangle=\sqrt{n+1}\,|n+1\rangle \tag{6.87 b}$$

$$\langle n|m\rangle=\delta_{n,m} \tag{6.88}$$

をみたすことがわかる．すなわち，$|n\rangle$ は数演算子 $\hat{n}$ の固有値 n に対応する規格化された固有ベクトルであることがわかる．

例題3　(6.86)，(6.87)，(6.88) を示せ．

解　(i) $\hat{a}^{\dagger}$ は $\hat{n}$ の固有値を1だけ増加させ，$|0\rangle$ の $\hat{n}$ の固有値は0であるから，$(\hat{a}^{\dagger})^{n}|0\rangle$ の $\hat{n}$ の固有値は n である．よって (6.86) が示された．

(ii) $|n\rangle$ の定義式 (6.85) より，

$$\hat{a}^\dagger|n\rangle=\hat{a}^\dagger\frac{1}{\sqrt{n\,!}}(a^\dagger)^n|0\rangle=\sqrt{n+1}\frac{1}{\sqrt{(n+1)\,!}}(a^\dagger)^{n+1}|0\rangle$$
$$=\sqrt{n+1}\,|n+1\rangle$$

となり，(6.87b)が得られる．

(iii) 上式で n を $(n-1)$ としたもの，

$$\hat{a}^\dagger|n-1\rangle=\sqrt{n}\,|n\rangle$$

の両辺に $\hat{a}$ を作用させると，

$$\hat{a}\hat{a}^\dagger\,|n-1\rangle=\sqrt{n}\,\hat{a}\,|n\rangle$$

となる．ところが，左辺は，

$$\hat{a}\hat{a}^\dagger\,|n-1\rangle=(\hat{a}^\dagger\hat{a}+[\hat{a},\hat{a}^\dagger])|n-1\rangle$$
$$=(\hat{n}+1)\,|n-1\rangle$$
$$=n\,|n-1\rangle$$

と変形できるから，(6.87 a)が示される．

(iv) (6.87 a)の両辺のノルムをとると，

$$\langle n|\hat{a}^\dagger\hat{a}|n\rangle=n\langle n-1|n-1\rangle$$

となるが，左辺は，

$$\langle n|\hat{n}|n\rangle=n\langle n|n\rangle$$

であるから，

$$\langle n|n\rangle=\langle n-1|n-1\rangle$$

であること，すなわち $\langle n|n\rangle$ は n によらないことがわかる．よって，$\langle n|n\rangle=\langle 0|0\rangle=1$ がわかる．$n\neq m$ ならば，$|n\rangle$ と $|m\rangle$ はエルミート演算子 $\hat{n}$ の異なる固有値に属するから，$\langle n|m\rangle=0$ である．よって $\{|n\rangle\}$ が正規直交であること(6.88)がわかった．　∎

ここで，$|n\rangle$ $(n=0,1,2,\cdots)$ によってはられる空間を V_0 とすると，(6.87)は，V_0 が演算子 $\hat{a}$ と $\hat{a}^\dagger$ との作用について閉じていることを示している．ところが，$\hat{a}$，$\hat{a}^\dagger$ の定義式(6.77)は逆に解くことができて，

$$\hat{q}=\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(\hat{a}+\hat{a}^\dagger) \tag{6.89 a}$$

$$\hat{p}=-i\sqrt{\frac{\hbar m\omega}{2}}(\hat{a}-\hat{a}^\dagger) \tag{6.89 b}$$

となるから，V_0 は $\hat{q}$ および $\hat{p}$ の作用についても閉じている．いまは，1自由度の問題を考えており，$\hat{q}$，$\hat{p}$ 以外には自由度はないので，状態空間 V は V_0 そのものであるとしてよい．以上によって，$\hat{a}, \hat{a}^\dagger$ が状態空間にどのように作用するかが完全に決

定された．

この最後の部分の議論を少し奇異に感じるかもしれないので，少し補足しておこう．ここまでの議論では，(6.82)をみたすような状態ベクトル$|0\rangle$が存在するといっているだけであり，それが一意的であるとは主張していない．実際，$\hat{a}|v\rangle=0$をみたす1次独立なベクトルがいくつかあったとして，それらを$|0\rangle', |0\rangle'', |0\rangle''', \cdots$とすると，そのそれぞれの上に，$\hat{q}$と$\hat{p}$の作用に関して閉じた部分空間がつくられる．すなわち，

$$V_0'=\{\sum_n c_n(\hat{a}^\dagger)^n|0\rangle'\ ;\ c_n\in \boldsymbol{C}\}$$
$$V_0''=\{\sum_n c_n(\hat{a}^\dagger)^n|0\rangle''\ ;\ c_n\in \boldsymbol{C}\} \tag{6.90}$$
$$\cdots$$

とすると，これらはすべて$\hat{q}$と$\hat{p}$の作用について閉じている．しかし，それらは一見してわかるように，すべて同じ構造をもっているから，それらを区別するためには，$\hat{q}, \hat{p}$以外の他の変数が必要である．それゆえ，$\hat{q}$，$\hat{p}$以外の変数がないときは，状態空間としては，$V_0', V_0'', \cdots$ のうちの1つだけで十分と考えるのである．座標表示を導入したときに，(6.59)のすぐあとに述べたように，$V=V_0$と仮定したのもまったく同じ理由によるものである(6.5節191ページの脚注参照)．

調和振動子のエネルギー準位・固有状態

ところで，ハミルトニアンは，(6.81)のように$\hat{H}=\hbar\omega\left(\hat{n}+\dfrac{1}{2}\right)$と書けているから，上の$|n\rangle$ $(n=0,1,2,\cdots)$はハミルトニアンを完全に対角化していることがわかる．すなわち，調和振動子(6.75)のエネルギー固有値は，

$$E_n=\hbar\omega\left(n+\frac{1}{2}\right)\quad (n=0,1,2,\cdots) \tag{6.91}$$

で与えられ，その縮退度はすべて1であることがわかった．また，$|n\rangle$を座標表示すると，ここで与えられた解が，4.7節で考えたものに一致していることも具体的に示せる．

例題 4　上で与えた状態ベクトル$|n\rangle$を座標表示で表せ．

解　まず，基底状態$|0\rangle$の座標表示を考える．$|0\rangle$のみたす式，$\hat{a}|0\rangle=0$は座標表示では，

$$0=\langle q'|\hat{a}|0\rangle=\frac{1}{\sqrt{2\hbar}}\langle q'|\sqrt{m\omega}\,\hat{q}+i\frac{1}{\sqrt{m\omega}}\hat{p}|0\rangle$$
$$=\frac{1}{\sqrt{2\hbar}}\left(\sqrt{m\omega}\,q'+\frac{\hbar}{\sqrt{m\omega}}\frac{\partial}{\partial q'}\right)\langle q'|0\rangle$$

となる．これを解くと，

$$\langle q'|0\rangle=\left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}}\exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar}q'^2\right)$$

となる．ここで，積分定数は，

$$1=\langle 0|0\rangle=\int dq'\langle 0|q'\rangle\langle q'|0\rangle$$

から決めた．つぎに，

$$\begin{aligned}\langle q'|\hat{a}^\dagger&=\langle q'|\frac{1}{\sqrt{2\hbar}}\left(\sqrt{m\omega}\,\hat{q}-i\frac{1}{\sqrt{m\omega}}\hat{p}\right)\\&=\left(\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}q'-\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\frac{\partial}{\partial q'}\right)\langle q'|\end{aligned}$$

より，

$$\begin{aligned}\langle q'|n\rangle&=\frac{1}{\sqrt{n!}}\langle q'|(\hat{a}^\dagger)^n|0\rangle\\&=\left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}}\frac{1}{\sqrt{n\,!}}\left(\frac{1}{\sqrt{2}}\right)^n\left\{\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}q'\right)-\frac{\partial}{\partial\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}q'\right)}\right\}^n\exp\left(-\frac{1}{2}\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}q'\right)^2\right)\\&=\left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}}\frac{1}{\sqrt{n!}}\left(\frac{1}{\sqrt{2}}\right)^nH_n\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}q'\right)\exp\left(-\frac{1}{2}\frac{m\omega}{\hbar}q'^2\right)\end{aligned}$$

となり，たしかに第4章で得られたものと一致している．ここで $H_n(x)$ はエルミート多項式であり，

$$H_n(x)=\exp\left(\frac{1}{2}x^2\right)\left(x-\frac{d}{dx}\right)^n\exp\left(-\frac{1}{2}x^2\right)$$

で定義されている．　▮

多自由度の場合

多自由度の調和振動子を考えておこう．ハミルトニアンは一般に，

$$\hat{H}=\frac{1}{2}\sum_{i,j=1}^{f}M_{ij}\hat{p}_i\hat{p}_j+\frac{1}{2}\sum_{i,j=1}^{f}K_{ij}\hat{q}_i\hat{q}_j \tag{6.92}$$

の形をしているとしよう．ここで，$\hat{p}_i, \hat{q}_i\ (i=1,2,\cdots,f)$ は正準交換関係をみたしており，M_{ij}, K_{ij} は対称かつ，正定値の行列とする．古典力学でよく知られているように，これは，適当に変数をとりかえることにより，

$$\hat{H}=\frac{1}{2}\sum_{i=1}^{f}\hat{P}_i^2+\frac{1}{2}\sum_{i=1}^{f}\omega_i^2\hat{Q}_i^2 \tag{6.93}$$

と書くことができる．ここで，$\hat{P}_i, \hat{Q}_i\ (i=1,2,\cdots,f)$ も正準交換関係をみたす．このように書いたときの各 i のことをノーマルモードあるいは単にモードとよんでい

る．つぎに，各モード i に関する生成・消滅演算子を，

$$\hat{a}_i=\frac{1}{\sqrt{2\hbar}}\left(\sqrt{\omega_i}\,\hat{Q}_i+i\frac{1}{\sqrt{\omega_i}}\hat{P}_i\right) \tag{6.94 a}$$

$$\hat{a}_i{}^\dagger=\frac{1}{\sqrt{2\hbar}}\left(\sqrt{\omega_i}\,\hat{Q}_i-i\frac{1}{\sqrt{\omega_i}}\hat{P}_i\right) \tag{6.94 b}$$

で定義すると，交換関係は，

$$[\hat{a}_i, \hat{a}_j{}^\dagger]=\delta_{ij} \tag{6.95}$$

となり，ハミルトニアンは，

$$\hat{H}=\sum_i \hbar\omega_i\left(\hat{a}_i{}^\dagger\hat{a}_i+\frac{1}{2}\right) \tag{6.96}$$

と書けることがわかる．

例題 5　(6.95) と (6.96) を示せ．

解　(i) n 組の $\hat{P}_i, \hat{Q}_i$ のうち，ちがう組に属するものどうしは可換であるから，$i\neq j$ のとき，$\hat{a}_i$ や $\hat{a}_i{}^\dagger$ は $\hat{a}_j$ や $\hat{a}_j{}^\dagger$ と可換である．$i=j$ のときは，1 自由度の場合と同じであるから，(6.95) が得られる．

(ii) ハミルトニアン (6.93) では，各自由度 $\hat{P}_i$，$\hat{Q}_i$ はおたがいに独立であるから，1 自由度の場合の和をとればよいだけであり，(6.96) を得る．∎

つぎに，各モード i に対する数演算子 $\hat{n}_i$ を，

$$\hat{n}_i=\hat{a}_i{}^\dagger\hat{a}_i \quad (i=1, 2, \cdots, n) \tag{6.97}$$

で定義すると，これらはエルミートであり，(6.95) から明らかなようにたがいに可換である．すなわち，

$$[\hat{n}_i, \hat{n}_j]=0 \tag{6.98}$$

また，1 自由度の場合とまったく同様にして，

$$[\hat{n}_i, \hat{a}_j]=-\delta_{ij}\hat{a}_j \tag{6.99a}$$

$$[\hat{n}_i, \hat{a}_j{}^\dagger]=\delta_{ij}\hat{a}_j{}^\dagger \tag{6.99b}$$

を示すことができるから，$\hat{a}_i{}^\dagger$，$\hat{a}_i$ が $\hat{n}_i$ の固有値を 1 だけ増減する作用になっていることも明らかであろう．

ところで，$\hat{n}_i$ はたがいに可換であるから，同時に対角化できる．そうすると，1 自由度の場合とまったく同様に考えれば，その固有値はどれもゼロか正の整数でなければならず，けっきょく，どのモードの消滅演算子をかけても 0 になるような状態 $|0\rangle$ の存在がいえる．

$$a_i|0\rangle=0 \quad (i=1, 2, \cdots, f), \tag{6.100}$$

ここで $|0\rangle$ は $\langle 0|0\rangle=1$ のように規格化されているとする．各モードの演算子はたがいに独立である，すなわち，異なるモードに属する演算子は可換であることを思い

だすと，

$$|n_1, n_2, \cdots, n_f\rangle = \frac{1}{\sqrt{n_1!}}\cdots\frac{1}{\sqrt{n_f!}}(\hat{a}_1{}^\dagger)^{n_1}\cdots(\hat{a}_f{}^\dagger)^{n_f}|0\rangle \tag{6.101}$$

ではられる空間が $\hat{a}_i$ および $\hat{a}_i{}^\dagger$ $(i=1, 2, \cdots, f)$ で閉じていることは自明であろう．

例題6　以下の式を示せ．

(i) $\hat{n}_i|n_1, n_2, \cdots, n_f\rangle = n_i|n_1, n_2, \cdots, n_f\rangle$

(ii) $\hat{a}_i|n_1, n_2, \cdots, n_f\rangle = \sqrt{n_i}|n_1, n_2, \cdots, n_i-1, \cdots, n_f\rangle$

(iii) $\hat{a}_i{}^\dagger|n_1, n_2, \cdots, n_f\rangle = \sqrt{n_i+1}|n_1, n_2, \cdots, n_i+1, \cdots, n_f\rangle$

解　(i) 生成演算子 $\hat{a}_i{}^\dagger$ は $\hat{n}_i$ の固有値を1増加させ，他の $\hat{n}_j\,(j\neq i)$ の固有値は動かさない．状態 $|0\rangle$ の $\hat{n}_i$ の固有値は全部0であるから，$|n_1, \cdots, n_f\rangle$の定義式(6.101)から，その $\hat{n}_i$ の固有値が n_i であることは明らかであろう．

(ii) 直接計算して示すことにしよう．

$$\begin{aligned}&\hat{a}_i|n_1, n_2, \cdots, n_f\rangle\\&=\hat{a}_i\frac{1}{\sqrt{n_1!}}\cdots\frac{1}{\sqrt{n_f!}}(\hat{a}_1{}^\dagger)^{n_1}\cdots(\hat{a}^\dagger{}_f)^{n_f}|0\rangle\\&=\frac{1}{\sqrt{n_1!}}\cdots\frac{1}{\sqrt{n_f!}}\{[\hat{a}_i,\ (\hat{a}_1{}^\dagger)^{n_1}\cdots(\hat{a}_f{}^\dagger)^{n_f}]+(\hat{a}_1{}^\dagger)^{n_1}\cdots(\hat{a}_f{}^\dagger)^{n_f}\hat{a}_i\}|0\rangle\end{aligned}$$

と書くと，{　　} 内の第2項は，(6.100)より0を与える．一方，第1項は，$\hat{a}_j{}^\dagger(j\neq i)$ が $\hat{a}_i$ と可換であることより，

$$\begin{aligned}&[\hat{a}_i, (\hat{a}_1{}^\dagger)^{n_1}\cdots(\hat{a}_f{}^\dagger)^{n_f}]\\&=(\hat{a}_1{}^\dagger)^{n_1}\cdots(\hat{a}_{i-1}{}^\dagger)^{n_{i-1}}[\hat{a}_i,\ (\hat{a}_i{}^\dagger)^{n_i}](\hat{a}_{i+1}{}^\dagger)^{n_{i+1}}\cdots(\hat{a}_f{}^\dagger)^{n_f}\end{aligned}$$

となる．また，

$$[\hat{a}_i, (\hat{a}_i{}^\dagger)^{n_i}] = n_i(\hat{a}_i{}^\dagger)^{n_i-1}$$

は簡単に示せるから，けっきょく，

$$\hat{a}_i|n_1, n_2, \cdots, n_f\rangle = \frac{1}{\sqrt{n_1!}}\cdots\frac{1}{\sqrt{n_f!}}\,n_i(\hat{a}_1{}^\dagger)^{n_1}\cdots(\hat{a}_i{}^\dagger)^{n_i-1}\cdots(\hat{a}_f{}^\dagger)^{n_f}|0\rangle$$

となり，望む結果が得られる．

(iii) $\hat{a}_i{}^\dagger|n_1, n_2, \cdots, n_f\rangle$

$$\begin{aligned}&=\hat{a}_i{}^\dagger\frac{1}{\sqrt{n_1!}}\cdots\frac{1}{\sqrt{n_f!}}(\hat{a}_1{}^\dagger)^{n_1}\cdots(\hat{a}_f{}^\dagger)^{n_f}|0\rangle\\&=\frac{1}{\sqrt{n_1!}}\cdots\frac{1}{\sqrt{n_f!}}(\hat{a}_1{}^\dagger)^{n_1}\cdots(\hat{a}_i{}^\dagger)^{n_i+1}\cdots(\hat{a}_f{}^\dagger)^{n_f}|0\rangle\end{aligned}$$

から明らかである．　∎

ところで，ハミルトニアン(6.96)は $\hat{n}_i$ を使うと，

$$\hat{H}=\sum_{i=1}^{f}\hbar\omega_i\left(\hat{n}_i+\frac{1}{2}\right) \tag{6.102}$$

と書ける．これは，$\hat{H}$ が，基底 $\{|n_1,\cdots,n_f\rangle\}$ により完全に対角化されており，その固有値は，

$$E_{n_1,\cdots,n_f}=\sum_{i=1}^{f}\hbar\omega_i\left(n_i+\frac{1}{2}\right) \tag{6.103}$$

で与えられることを示している．

［問題 9］ Heisenberg 描像での生成・消滅演算子の時間発展を求めよ．

［解］ ハミルトニアンの表式 $\hat{H}=\hbar\omega\left(\hat{a}^\dagger\hat{a}+\frac{1}{2}\right)$，および交換関係 $[\hat{a},\hat{a}^\dagger]=1$ より，$\hat{a},\hat{a}^\dagger$ に対する Heisenberg 方程式は，

$$\frac{d}{dt}\hat{a}=\frac{1}{i\hbar}[\hat{a},\hat{H}]=-i\omega\hat{a}$$

$$\frac{d}{dt}\hat{a}^\dagger=\frac{1}{i\hbar}[\hat{a}^\dagger,\hat{H}]=i\omega\hat{a}^\dagger$$

となる．これは簡単に積分できて，

$$\hat{a}(t)=e^{-i\omega t}\hat{a}(0)$$

$$\hat{a}^\dagger(t)=e^{i\omega t}\hat{a}^\dagger(0)$$

を得る．　▮

第6章　章 末 問 題

［1］ (1) Schrödinger 描像でみたときに，時間 t に陽に依存している演算子 $\hat{O}_S(t)$ があったとする．Heisenberg 描像に移ったときに，対応する演算子 $\hat{O}_H(t)$ のみたす Heisenberg 方程式はどのようになるか．

(2) 例として，1 次元の質量mの自由粒子に対して，$\hat{O}=\hat{x}-t\dfrac{\hat{p}}{m}$ を考えよ．

［解］ (1) この場合も，2 つの描像の対応は，

$${}_S\langle\psi|\hat{O}_S(t)|\psi\rangle_S={}_H\langle\psi|\hat{O}_H(t)|\psi\rangle_H$$

で与えられるべきであるから，(6.42 b) はそのままであり，

$$\hat{O}_H(t)=\exp\left(-\frac{1}{i\hbar}\hat{H}(t-t_0)\right)\hat{O}_S(t)\exp\left(\frac{1}{i\hbar}\hat{H}(t-t_0)\right)$$

が成り立つ．ただし，右辺の $\hat{O}_S(t)$ は陽な t 依存性をもっていることに注意しよう．両辺を t で微分すると，

$$\frac{d}{dt}\hat{O}_{\mathrm{H}}(t)=-\frac{1}{i\hbar}\hat{H}\exp\left(-\frac{1}{i\hbar}\hat{H}(t-t_0)\right)\hat{O}_{\mathrm{S}}(t)\exp\left(\frac{1}{i\hbar}\hat{H}(t-t_0)\right)$$
$$+\exp\left(-\frac{1}{i\hbar}\hat{H}(t-t_0)\right)\left(\frac{d}{dt}\hat{O}_{\mathrm{S}}(t)\right)\exp\left(\frac{1}{i\hbar}\hat{H}(t-t_0)\right)$$
$$+\exp\left(-\frac{1}{i\hbar}\hat{H}(t-t_0)\right)\hat{O}_{\mathrm{S}}(t)\exp\left(\frac{1}{i\hbar}\hat{H}(t-t_0)\right)\frac{1}{i\hbar}\hat{H}$$
$$=\frac{1}{i\hbar}[\hat{O}_{\mathrm{H}}(t),\ \hat{H}]+\exp\left(-\frac{1}{i\hbar}\hat{H}(t-t_0)\right)\left(\frac{d}{dt}\hat{O}_{\mathrm{S}}(t)\right)\exp\left(\frac{1}{i\hbar}\hat{H}(t-t_0)\right)$$

となるが，最後の表式の第 2 項は，$\hat{O}_{\mathrm{H}}(t)$ の陽な t 依存性を与えているから，$\frac{\partial}{\partial t}\hat{O}_{\mathrm{H}}(t)$ と書ける．けっきょく，演算子が陽な t 依存性をもっているときの Heisenberg 方程式は，

$$\frac{d}{dt}\hat{O}_{\mathrm{H}}=\frac{1}{i\hbar}[\hat{O}_{\mathrm{H}}, \hat{H}]+\frac{\partial}{\partial t}\hat{O}_{\mathrm{H}} \qquad ⓐ$$

で与えられる．

(2) 物理的には，演算子 $\hat{O}=\hat{x}-t\frac{\hat{p}}{m}$ は時刻 $t=0$ における位置であり，$\hat{O}$ は t に依存しないはずである．実際，$\hat{H}=\frac{1}{2m}\hat{p}^2$ と $\hat{O}$ の表式をⓐに代入すると，

$$\frac{d}{dt}\hat{O}=\frac{1}{i\hbar}[\hat{O}, \hat{H}]+\frac{\partial}{\partial t}\hat{O}$$
$$=\frac{1}{i\hbar}\left[\hat{x}-t\frac{\hat{p}}{m}, \frac{1}{2m}\hat{p}^2\right]+\frac{\partial}{\partial t}\left(\hat{x}-t\frac{\hat{p}}{m}\right)$$
$$=\frac{1}{i\hbar}\frac{\hat{p}}{m}[\hat{x}, \hat{p}]-\frac{\hat{p}}{m}$$
$$=0$$

となり，たしかに $\frac{d}{dt}\hat{O}=0$ となっている．

[2]　1 次元の質量mの自由粒子を考える．

(1) 時刻 $t=0$ で $x=x'$ にあった粒子が，時刻 t で $x=x''$ のところにいる確率振幅は，

$$G(x'', x'\,;\,t)=\langle x''|\exp\left(-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t\right)|x'\rangle$$

で与えられることを示せ．これを自由粒子の Green 関数とよんでいる．

(2) Green 関数 $G(x'', x'\,;\,t)$ を求めよ．

(3) 3 次元の自由粒子の場合はどうなるか．

[解]　(1) 時刻 $t=0$ で粒子が $x=x'$ にあったとすると，その状態ベクトルは $|x'\rangle$ で

ある．時間 t のあとに，この状態は $\exp\left(-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t\right)|x'\rangle$ になるから，このとき，粒子が $x=x''$ のところにいる確率振幅は，$\langle x''|\exp\left(-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t\right)|x'\rangle$ で与えられる．

(2) $G(x'',x';t)$ の表式に，運動量の完全系 $1=\int dp|p\rangle\langle p|$ を挿入すると，

$$G(x'',x';t)=\int dp\langle x''|\exp\left(-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t\right)|p\rangle\langle p|x'\rangle$$

となるが，$\hat{H}=\frac{1}{2m}\hat{p}^2$ だから，

$$=\int dp\exp\left(-\frac{i}{\hbar}\frac{p^2}{2m}t\right)\langle x''|p\rangle\langle p|x'\rangle$$

$$=\frac{1}{2\pi\hbar}\int dp\exp\left(-\frac{i}{\hbar}\frac{p^2}{2m}t\right)\exp\left(\frac{i}{\hbar}p(x''-x')\right)$$

が得られる．ここで，$\langle x|p\rangle=\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\exp\left(\frac{i}{\hbar}px\right)$ を使った．最後の Gauss 積分は簡単に評価できて，

$$G(x'',x';t)=\sqrt{\frac{m}{i2\pi\hbar t}}\exp\left(\frac{i}{\hbar}\frac{m}{2t}(x''-x')^2\right)$$

となる．

(3) 3次元の場合の Green 関数は，

$$G(\boldsymbol{x}'',\boldsymbol{x}';t)=\langle\boldsymbol{x}''|\exp\left(-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t\right)|\boldsymbol{x}'\rangle$$

である．1次元の場合と同様に，運動量の完全系，$1=\int d^3p|\boldsymbol{p}\rangle\langle\boldsymbol{p}|$ を挿入すれば，

$$G(\boldsymbol{x}'',\boldsymbol{x}';t)=\left(\frac{m}{i2\pi\hbar t}\right)^{\frac{3}{2}}\exp\left(\frac{i}{\hbar}\frac{m}{2t}(\boldsymbol{x}''-\boldsymbol{x}')^2\right)$$

が得られる．

［3］ 1次元の調和振動子を考える．消滅演算子 $\hat{a}$ の固有ベクトル $|\lambda\rangle$

$$\hat{a}|\lambda\rangle=\lambda|\lambda\rangle\quad(\lambda \text{ は複素数})$$

のことをコヒーレント状態とよぶ．

(1) 基底状態を $|0\rangle$ として，

$$|\lambda\rangle=\exp\left(-\frac{1}{2}|\lambda|^2\right)\exp(\lambda\hat{a}^\dagger)|0\rangle$$

と書けることを示せ．ここで，$|\lambda\rangle$ は1に規格化されているとする．

(2) $|\lambda\rangle$ の座標表示 $\langle q|\lambda\rangle$ を求めよ．

(3) $|\lambda\rangle$ はどのように時間発展するか．

(4) $1=\dfrac{1}{\pi}\displaystyle\int d^2\lambda|\lambda\rangle\langle\lambda|$ を示せ．ただし，積分の意味は $\lambda=\lambda_R+i\lambda_I$ $(\lambda_R,\lambda_I\in\boldsymbol{R})$ に対して $\displaystyle\int d^2\lambda=\int d\lambda_R d\lambda_I$ である．

［解］ (1) $|\lambda\rangle$ を数演算子の固有状態 $|n\rangle=\dfrac{1}{\sqrt{n!}}(\hat{a}^\dagger)^n|0\rangle$ で展開して，

$|\lambda\rangle=\sum_{n=0}^{\infty}c_n|n\rangle$ とおこう．そうすると，

$$\hat{a}|\lambda\rangle=\sum_{n=0}^{\infty}c_n\hat{a}|n\rangle=\sum_{n=1}^{\infty}c_n\sqrt{n}|n-1\rangle$$
$$=\sum_{n=0}^{\infty}c_{n+1}\sqrt{n+1}|n\rangle$$

となるが，これが，$\lambda|\lambda\rangle=\sum_{n=0}^{\infty}\lambda c_n|n\rangle$ に等しいから，

$$c_{n+1}\sqrt{n+1}=\lambda c_n$$

を得る．これから，$c_n=\dfrac{\lambda^n}{\sqrt{n!}}c_0$ となり，

$$|\lambda\rangle=\sum_{n=0}^{\infty}c_n|n\rangle=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{\lambda^n}{\sqrt{n!}}c_0\frac{1}{\sqrt{n!}}(\hat{a}^\dagger)^n|0\rangle$$
$$=c_0e^{\lambda\hat{a}^\dagger}|0\rangle$$

が得られる．

規格化因子を求めるために，$\langle\lambda|\lambda\rangle$ を計算すると，

$$\langle\lambda|\lambda\rangle=\sum_{n=0}^{\infty}|c_n|^2=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{|\lambda|^{2n}}{n!}|c_0|^2=e^{|\lambda|^2}|c_0|^2$$

であるから，$|c_0|=e^{-\frac{1}{2}|\lambda|^2}$ とすればよいことがわかる．よって，

$$|\lambda\rangle=\exp\left(-\frac{1}{2}|\lambda|^2\right)\exp(\lambda\hat{a}^\dagger)|0\rangle$$

が規格化されたコヒーレント状態である．

(2) $\hat{a}^\dagger=\sqrt{\dfrac{m\omega}{2\hbar}}\hat{q}-i\sqrt{\dfrac{1}{2\hbar m\omega}}\hat{p}$ より，

$$\exp(\lambda\hat{a}^\dagger)=\exp\left(\lambda\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\hat{q}-i\lambda\sqrt{\frac{1}{2\hbar m\omega}}\hat{p}\right)$$
$$=\exp\left(\lambda\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\hat{q}\right)\exp\left(-i\lambda\sqrt{\frac{1}{2\hbar m\omega}}\hat{p}\right)\cdot$$
$$\cdot\exp\left(-\frac{1}{2}\left[\lambda\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\hat{q},-i\lambda\sqrt{\frac{1}{2\hbar m\omega}}\hat{p}\right]\right)$$

$$=\exp\left(\lambda\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\hat{q}\right)\exp\left(-i\lambda\sqrt{\frac{1}{2\hbar m\omega}}\hat{p}\right)\exp\left(-\frac{1}{4}\lambda^2\right)$$

を得る．ここで，公式

$$e^{\hat{A}+\hat{B}}=e^{\hat{A}}e^{\hat{B}}e^{-\frac{1}{2}[\hat{A},\hat{B}]}\qquad \text{（ただし，}[\hat{A},\hat{B}]\text{ は c 数}^{1)}\text{とする）}$$

を使った．

また，$\hat{p}|q\rangle=i\hbar\frac{\partial}{\partial q}|q\rangle$ より，一般の c に対して，

$$\exp(ic\hat{p})|q\rangle=\exp\left(ic\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial q}\right)\right)|q\rangle=|q-\hbar c\rangle$$

であるが，この両辺の随伴をとると，

$$\langle q|\exp(-ic\hat{p})=\langle q-\hbar c|$$

が得られる．これを使うと，

$$\langle q|\exp(\lambda\hat{a}^\dagger)=\langle q|\exp\left(\lambda\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\hat{q}\right)\exp\left(-i\lambda\sqrt{\frac{1}{2\hbar m\omega}}\hat{p}\right)\exp\left(-\frac{1}{4}\lambda^2\right)$$
$$=\exp\left(-\frac{1}{4}\lambda^2\right)\exp\left(\lambda\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}q\right)\langle q-\lambda\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}|$$

となることがわかる．

さらに，$\langle q|0\rangle=\left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}}\exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar}q^2\right)$ であることを使って最終的に，

$$\langle q|\lambda\rangle=\exp\left(-\frac{1}{2}|\lambda|^2\right)\langle q|\exp(\lambda\hat{a}^\dagger)|0\rangle$$
$$=\exp\left(-\frac{1}{2}|\lambda|^2\right)\exp\left(-\frac{1}{4}\lambda^2\right)\exp\left(\lambda\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}q\right)\langle q-\lambda\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}|0\rangle$$
$$=\left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}}\exp\left(-\frac{1}{2}|\lambda|^2-\frac{1}{4}\lambda^2+\lambda\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}q-\frac{m\omega}{2\hbar}\left(q-\lambda\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\right)^2\right)$$
$$=\left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}}\exp\left(-\frac{1}{2}(|\lambda|^2-\lambda^2)\right)\exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar}\left(q-2\lambda\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\right)^2\right)$$

が得られる．

(3) 時刻 $t=0$ で $|\lambda\rangle$ という状態にあったとすると，時刻 t では，$\exp\left(-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t\right)|\lambda\rangle$ の状態にある．これは，

$$\exp\left(-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t\right)|\lambda\rangle$$
$$=\exp\left(-\frac{1}{2}|\lambda|^2\right)\exp\left(-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t\right)\exp\left(\lambda\hat{a}^\dagger\right)|0\rangle$$

---

1) 単位行列1の定数倍のことをc数とよぶことにする．

$$=\exp\left(-\frac{1}{2}|\lambda|^2\right)\exp\left(-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t\right)\exp\left(\lambda\hat{a}^\dagger\right)\exp\left(\frac{i}{\hbar}\hat{H}t\right)\exp\left(-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t\right)|0\rangle$$

と書けるが，

$$\exp\left(-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t\right)\exp\left(\lambda\hat{a}^\dagger\right)\exp\left(\frac{i}{\hbar}\hat{H}t\right)$$
$$=\exp\left[\lambda\exp\left(-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t\right)\hat{a}^\dagger\exp\left(\frac{i}{\hbar}\hat{H}t\right)\right]$$
$$=\exp\left(\lambda e^{-i\omega t}\hat{a}^\dagger\right)$$

および，

$$\exp\left(-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t\right)|0\rangle=\exp\left(-i\frac{\omega}{2}t\right)|0\rangle$$

を使うと，

$$\exp\left(-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t\right)|\lambda\rangle=\exp\left(-\frac{1}{2}|\lambda|^2\right)\exp\left(-i\frac{\omega}{2}t\right)\cdot$$
$$\cdot\exp\left(\lambda e^{-i\omega t}\hat{a}^\dagger\right)|0\rangle$$
$$=\exp\left(-i\frac{\omega}{2}t\right)|\lambda e^{-i\omega t}\rangle$$

となることがわかる．

(4) $|\lambda\rangle=\exp\left(-\frac{1}{2}|\lambda|^2\right)\sum_{n=0}^{\infty}\frac{\lambda^n}{\sqrt{n\,!}}|n\rangle$ の随伴をとると，

$\langle\lambda|=\exp\left(-\frac{1}{2}|\lambda|^2\right)\sum_{n=0}^{\infty}\frac{\lambda^{*n}}{\sqrt{n\,!}}\langle n|$ となるが，この2式より，

$$\frac{1}{\pi}\int d^2\lambda|\lambda\rangle\langle\lambda|=\frac{1}{\pi}\int d^2\lambda\exp(-|\lambda|^2)\sum_{n=0}^{\infty}\sum_{m=0}^{\infty}\frac{\lambda^n\lambda^{*m}}{\sqrt{n\,!\,m\,!}}|n\rangle\langle m|$$
$$=\frac{1}{\pi}\int_{-\pi}^{\pi}d\theta\int_0^\infty dr\ r\exp(-r^2)\sum_{n=0}^{\infty}\sum_{m=0}^{\infty}\frac{r^{n+m}}{\sqrt{n\,!\,m\,!}}e^{i(n-m)\theta}|n\rangle\langle m|$$
$$=2\int_0^\infty dr\ r\exp(-r^2)\sum_{n=0}^{\infty}\frac{r^{2n}}{n!}|n\rangle\langle n|$$
$$=\sum_{n=0}^{\infty}|n\rangle\langle n|=1$$

が示される．ここで，極座標 $\lambda=re^{i\theta}$ を導入した．

［4］ 1次元の調和振動子 $\hat{H}=\frac{1}{2m}\hat{p}^2+\frac{m\omega^2}{2}\hat{q}^2$ に対して，Green 関数

$$G(q'',q'\,;\,t)=\langle q''|\exp\left(-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t\right)|q'\rangle$$

を求めよ．

[解]　[3]の結果を使って，つぎのように計算しよう．

$$G(q'',q';t)=\langle q''|\exp\left(-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t\right)\left(\frac{1}{\pi}\int d^2\lambda|\lambda\rangle\langle\lambda|\right)|q'\rangle \qquad [3.(4)]$$

$$=\exp\left(-i\frac{\omega}{2}t\right)\frac{1}{\pi}\int d^2\lambda\langle q''|\lambda e^{-i\omega t}\rangle\langle\lambda|q'\rangle \qquad [3.(3)]$$

一方，[3]の(2)より，

$$\langle q|\lambda\rangle=\frac{\sqrt{\alpha}}{\pi^{\frac{1}{4}}}\exp\left(-\frac{1}{2}(|\lambda|^2+\lambda^2)+\sqrt{2}\alpha q\lambda-\frac{1}{2}\alpha^2q^2\right)$$

が得られる．ここで，$\alpha=\sqrt{\dfrac{m\omega}{\hbar}}$ とした．これを使うと，

$$G(q',q'';t)$$

$$=\exp\left(-i\frac{\omega}{2}t\right)\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}\cdot\pi}\int d^2\lambda\exp\left[-|\lambda|^2-\frac{1}{2}\left(\lambda^2e^{-2i\omega t}+\lambda^{*2}\right)\right]\cdot$$

$$\cdot\exp\left[\sqrt{2}\alpha\left(q''\lambda e^{-i\omega t}+q'\lambda^*\right)-\frac{1}{2}\alpha^2(q'^2+q''^2)\right]$$

となる．ここで，右辺の $\int d^2\lambda$ は λ の実部と虚部についての2重積分を意味しているが，それはGauss積分であるから計算できて，

$$G(q',q'';t)=\sqrt{\frac{m\omega}{i2\pi\hbar\sin\omega t}}\exp\left[\frac{i}{\hbar}\frac{m\omega}{2\sin\omega t}\{(q'^2+q''^2)\cos\omega t-2q'q''\}\right]$$

が得られる．

第7章　角運動量と対称性

いろいろな保存則が系のもつ対称性と深く結びついていることは古典力学でもよく知られているが，量子力学ではそれがどのように表現され，実際にどのように現れているかを調べるのが本章の目的である．まず7.1節で，系の対称性が変換群に対するハミルトニアンの不変性という形で定式化できることを示す．その重要な例がユークリッド群に対する不変性であり，その帰結として運動量および角運動量の保存則が導かれるわけであるが，そのための数学的準備が7.2節である．この節は，群の表現論についてのまとめであり，はじめて読むときは目を通す程度にして，本章全体を読み終わったあとでもう一度読みなおせばよいと思う．7.3節では量子力学的な演算子として運動量・角運動量およびパリティを導入し，7.4節で角運動量の表現の一般論を展開する．電子や核子など多くの粒子は，スピンとよばれる古典論的には現れないような自由度をもっているが，それを導入するのが7.5節の目的である．7.6節では2つの角運動量をあわせたときのふるまいを議論するが，実用的には本章のなかで最も重要な部分である．以上のように対称性と保存則の関係はかなり統一的に記述できるが，時間が関係してくるような対称性については少し注意を要する．とくに，時間反転およびGalilei変換に対する不変性は概念的にも重要であり，7.7節にまとめておいた．

7.1 対称性と保存量

保存量

ハミルトニアン $\hat{H}$ と可換であるような物理量の演算子のことを保存量とよぶ．実際，つぎの例題に示すように，そのような演算子の固有値は，時間によらずに一定である．

例題 1 $\hat{O}$ をハミルトニアン $\hat{H}$ と可換な演算子とする．ある時刻 $t=t_0$ において，状態ベクトル $|\psi(t_0)\rangle$ は $\hat{O}$ の固有値 λ に対応する固有状態であったとする．そのような状態ベクトルは，時間発展をしても，$\hat{O}$ の固有値 λ に対応する固有ベクトルであり続けることを示せ．

解 時刻 t における状態ベクトル $|\psi(t)\rangle$ は $|\psi(t_0)\rangle$ を使って，

$$|\psi(t)\rangle=\exp\left(\frac{1}{i\hbar}\hat{H}(t-t_0)\right)|\psi(t_0)\rangle$$

と書ける．$\hat{O}$ と $\hat{H}$ が可換であることより，

$$\begin{aligned}\hat{O}|\psi(t)\rangle&=\hat{O}\exp\left(\frac{1}{i\hbar}\hat{H}(t-t_0)\right)|\psi(t_0)\rangle\\&=\exp\left(\frac{1}{i\hbar}\hat{H}(t-t_0)\right)\hat{O}|\psi(t_0)\rangle\\&=\exp\left(\frac{1}{i\hbar}\hat{H}(t-t_0)\right)\lambda|\psi(t_0)\rangle\\&=\lambda|\psi(t)\rangle\end{aligned}$$

が導かれる． ▮

演算子が保存するという言葉の意味は，Heisenberg 描像で考えるともっと明らかになるだろう．すなわち，Heisenberg 描像では，一般に演算子 $\hat{O}_{\mathrm{H}}$ は，Heisenberg 方程式

$$\frac{d}{dt}\hat{O}_{\mathrm{H}}=\frac{1}{i\hbar}[\hat{O}_{\mathrm{H}},\hat{H}] \tag{7.1}$$

に従って変化するが，$\hat{O}_{\mathrm{H}}$ と $\hat{H}$ が可換であれば右辺は 0 となり，$\hat{O}_{\mathrm{H}}$ は時間に依存しない演算子となる．

上の議論では，$\hat{O}$ は物理量の演算子であるとしたが，ユニタリーな演算子に対してもまったく同様のことがいえるのは明らかであろう．すなわち，ユニタリーな演算子 $\hat{U}$ がハミルトニアン $\hat{H}$ と可換であるとき，ある時刻において状態ベクトルが $\hat{U}$ の固有状態であれば，任意の時刻においても同じ固有値の固有状態であり続ける．ところで，$\hat{U}$ と $\hat{H}$ が可換であるという条件は，

$$\hat{U}^{-1}\hat{H}\hat{U}=\hat{H} \tag{7.2}$$

とも書けることに注意しよう．これは，$\hat{H}$ がユニタリー変換 $\hat{U}$ に対して不変であるということである．

対称性

一般に，系に対するある変換があって，系がそれに対して不変であるとき，すなわち，変換前の系と変換後の系がまったく同じにみえるときに，系はその変換に対応した対称性をもつという．量子力学の枠組みのなかでは，そのような変換として，状態ベクトルに作用するユニタリー変換を考えるのが適当であろう．すなわち，ハミルトニアン $\hat{H}$ がユニタリー変換 $\hat{U}$ に対して不変であるとき，系は $\hat{U}$ に対応した対称性をもつということにしよう．このとき，(7.2)の前後の議論からわかるように，$\hat{U}$ は保存量とみなせる．また，系が対称性をもつということを，つぎの例題のように考えてもよい．

例題 2　ハミルトニアン $\hat{H}$ がユニタリー変換 $\hat{U}$ に対して不変であったとする．すなわち，

$$\hat{U}^{-1}\hat{H}\hat{U}=\hat{H}$$

このとき，$|\psi(t)\rangle$ を Schrödinger 方程式の解とすると，$\hat{U}|\psi(t)\rangle$ も Schrödinger 方程式をみたすことを示せ．

解　$|\psi(t)\rangle$ が Schrödinger 方程式

$$i\hbar\frac{d}{dt}|\psi(t)\rangle=\hat{H}|\psi(t)\rangle$$

をみたしているとする．この両辺に $\hat{U}$ を作用させると，

$$i\hbar\frac{d}{dt}\hat{U}|\psi(t)\rangle=\hat{U}\hat{H}\hat{U}^{-1}\hat{U}|\psi(t)\rangle$$

となるが，$\hat{U}\hat{H}\hat{U}^{-1}=\hat{H}$ であれば，これは $\hat{U}|\psi(t)\rangle$ も Schrödinger 方程式をみたしていることを示している．　▮

量子力学における対称性の表し方の第1の例として，3.1節で議論したような1次元のポテンシャル問題におけるパリティを考えよう．ポテンシャル $V(x)$ をもつ，質量mの1次元粒子を考えると，ハミルトニアンは

$$\hat{H}=\frac{1}{2m}\hat{p}^2+V(\hat{x}) \tag{7.3}$$

で与えられる．ここでポテンシャル $V(x)$ は偶関数であるとすると，明らかに系はx軸の原点に関する折り返し

$$x\mapsto -x, \qquad p\mapsto -p \tag{7.4}$$

に対して不変である．実際，古典論的には，$x=f(t)$ が運動方程式の解であれば，x

$=-f(t)$ も運動方程式の解であることは自明であろう．

この対称性を量子力学的に表現するためには，(7.4)に対応して，

$$\hat{U}^{-1}\hat{x}\hat{U}=-\hat{x},\quad \hat{U}^{-1}\hat{p}\hat{U}=-\hat{p} \tag{7.5}$$

となるような，ユニタリー演算子 $\hat{U}$ を考えればよい．つぎの例題3に示すように，そのような $\hat{U}$ は実際に存在するが，そのとき $\hat{H}$ が $\hat{U}$ で不変なことは，

$$\begin{aligned}\hat{U}^{-1}\hat{H}\hat{U}&=\hat{U}^{-1}\left(\frac{1}{2m}\hat{p}^2+V(\hat{x})\right)\hat{U}\\&=\frac{1}{2m}(-\hat{p})^2+V(-\hat{x})\\&=\hat{H}\end{aligned} \tag{7.6}$$

から明らかであろう．

例題3 (1) 演算子 $\hat{U}$ を $\hat{U}|x\rangle=|-x\rangle\ (-\infty<x<\infty)$ として定義すると，$\hat{U}$ はユニタリーであり，(7.5)をみたすことを示せ．

(2) $\hat{U}^2=1$ であることを示せ．これは，物理的にはなにを意味するか．

(3) $\hat{U}$ の固有値は ±1 であることを示せ．それぞれの固有ベクトルは，x 表示の波動関数としてみると，どのようなものになっているか．

解 (1) (i) $\hat{U}$ の定義より，$\hat{U}|x'\rangle$ と $\hat{U}|x''\rangle$ の内積は，

$$\langle -x'|-x''\rangle=\delta(-x'+x'')=\delta(x'-x'')$$

であるが，これは $|x'\rangle$ と $|x''\rangle$ の内積に等しい．よって，$\hat{U}$ はユニタリーである．

(ii)
$$\begin{aligned}\hat{x}\hat{U}|x\rangle&=\hat{x}|-x\rangle=-x|-x\rangle\\&=-x\hat{U}|x\rangle=-\hat{U}x|x\rangle=-\hat{U}\hat{x}|x\rangle\end{aligned}$$

および，

$$\begin{aligned}\hat{p}\hat{U}|x\rangle&=\hat{p}|-x\rangle=-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}|-x\rangle\\&=-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\hat{U}|x\rangle=-\hat{U}\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial x}|x\rangle\right)=-\hat{U}\hat{p}|x\rangle\end{aligned}$$

より，$\hat{x}\hat{U}=-\hat{U}\hat{x}$，$\hat{p}\hat{U}=-\hat{U}\hat{p}$ となり，(7.5)を得る．

(2) $\hat{U}^2|x\rangle=\hat{U}\hat{U}|x\rangle=\hat{U}|-x\rangle=|x\rangle$

より $\hat{U}^2=1$ を得る．これは，物理的には x 軸の原点に関する折り返しを2回続けると，もとに戻ることに対応している．

(3) $\hat{U}$ はユニタリーであり，$\hat{U}^2=1$ であるから固有値は ±1 である．$\psi(x)=\langle x|\psi\rangle$ とすると，

$$\langle x|\hat{U}|\psi\rangle=\langle -x|\psi\rangle=\psi(-x)$$

であるから，$\hat{U}$ の固有値 $+1$ および -1 の固有状態は，それぞれ偶関数および奇関

数の波動関数に対応する．　▮

対称性の第2の例として，1次元の自由粒子の並進対称性を考えよう．x 軸上を動く質量mの自由粒子のハミルトニアンは，

$$H=\frac{1}{2m}p^2 \tag{7.7}$$

で与えられる．古典論的には，この系が x 軸に沿って c だけ移動させる変換

$$x\mapsto x+c,\quad p\mapsto p \tag{7.8}$$

に対して不変であることは明らかである．そのような変換は，量子力学的には，ケット $|x\rangle$ を $|x+c\rangle$ に写す変換 $\hat{U}(c)$ として表されると考えるのが自然であろう．

$$\hat{U}(c)|x\rangle=|x+c\rangle \tag{7.9}$$

実際，つぎの例題4に示すように，(7.9)で定義される演算子はユニタリーであり，(7.8)に対応する変換則

$$\hat{U}(c)^{-1}\hat{x}\hat{U}(c)=\hat{x}+c,\quad \hat{U}(c)^{-1}\hat{p}\hat{U}(c)=\hat{p} \tag{7.10}$$

をみたすことを示すことができ，このことから $\hat{H}$ が $\hat{U}(c)$ で不変であることがわかる．

例題4　(7.9)で定義される演算子 $\hat{U}(c)$ はユニタリーであり，かつ(7.10)をみたすことを示せ．このことから，$\hat{H}$ が $\hat{U}(c)$ で不変であることを導け．

解　(i) 2つのケット $|x'\rangle$ と $|x''\rangle$ の $\hat{U}(c)$ による像の間の内積は，

$$\langle x'+c|x''+c\rangle=\delta(x'-x'')$$

であるが，これはもとの内積 $\langle x'|x''\rangle$ に等しい．よって，$\hat{U}(c)$ は内積を保つ変換，すなわちユニタリー変換である．

(ii)
$$\begin{aligned}\hat{x}\hat{U}(c)|x'\rangle&=\hat{x}|x'+c\rangle=(x'+c)|x'+c\rangle\\&=(x'+c)\hat{U}(c)|x'\rangle=\hat{U}(c)(x'+c)|x'\rangle\\&=\hat{U}(c)(\hat{x}+c)|x'\rangle\end{aligned}$$

より，$\hat{U}(c)^{-1}\hat{x}\hat{U}(c)=\hat{x}+c$ が得られる．

$$\begin{aligned}\hat{p}\hat{U}(c)|x'\rangle&=\hat{p}|x'+c\rangle=i\hbar\frac{\partial}{\partial x'}|x'+c\rangle\\&=i\hbar\frac{\partial}{\partial x'}\hat{U}(c)|x'\rangle=\hat{U}(c)i\hbar\frac{\partial}{\partial x'}|x'\rangle\\&=\hat{U}(c)\hat{p}|x'\rangle\end{aligned}$$

より，$\hat{U}(c)^{-1}\hat{p}\hat{U}(c)=\hat{p}$ が得られる．

(iii)
$$\hat{U}(c)^{-1}\hat{H}\hat{U}(c)=\hat{U}(c)^{-1}\frac{1}{2m}\hat{p}^2\hat{U}(c)$$

$$=\frac{1}{2m}\left(\hat{U}(c)^{-1}\hat{p}\hat{U}(c)\right)^2$$

$$=\frac{1}{2m}\hat{p}^2=\hat{H}$$

となり，たしかに，$\hat{H}$ は $\hat{U}(c)$ で不変である．　■

変換群

系の対称性を表すためには，ハミルトニアンを不変に保つようなユニタリー変換の集合 $\mathscr{S}$ を指定してやればよい．ところが，つぎの例題5に示すように，ハミルトニアンがある変換に対して不変であれば，その逆変換に対しても不変であるし，2つの変換に対して不変であれば，それらを合成したものに対しても不変である．それゆえ，ユニタリー変換の集合 $\mathscr{S}$ としては，はじめから十分大きくとっておいて，変換の合成および逆をとる操作に対して閉じているとしたほうが自然である．すなわち，$\mathscr{S}$ は，

$$\begin{aligned}&\text{(i)}\ \hat{U}\in\mathscr{S}\quad \text{ならば}\quad \hat{U}^{-1}\in\mathscr{S}\\&\text{(ii)}\ \hat{U}_1,\ \hat{U}_2\in\mathscr{S}\quad \text{ならば}\quad \hat{U}_1\hat{U}_2\in\mathscr{S}\end{aligned}\tag{7.11}$$

という2つの性質をみたしているとする．そのような $\mathscr{S}$ は変換の合成に関して数学でいうところの群をなすため，$\mathscr{S}$ のことを変換群とよぶ．$\mathscr{S}$ は必然的に恒等変換を元として含むことに注意しよう．なぜならば，$\mathscr{S}$ の1つの元を $\hat{U}$ とすると，(7.11)の(i)より $\hat{U}^{-1}$ は $\mathscr{S}$ の元であり，さらに(ii)より，$1=\hat{U}^{-1}\hat{U}$ が $\mathscr{S}$ の元であることがわかるからである．恒等変換のことを変換群の単位元とよぶことがある．

例題5　(1) ハミルトニアン $\hat{H}$ がユニタリー変換 $\hat{U}$ で不変であれば，$\hat{U}^{-1}$ でも不変であることを示せ．

(2) ハミルトニアン $\hat{H}$ が2つのユニタリー変換 $\hat{U}_1$，$\hat{U}_2$ で不変であれば，$\hat{U}_1\hat{U}_2$ でも不変であることを示せ．

解　(1) $\hat{U}^{-1}\hat{H}\hat{U}=\hat{H}$ から $(\hat{U}^{-1})^{-1}\hat{H}\hat{U}^{-1}=\hat{H}$ は容易に導かれる．

(2) $\hat{U}_1^{-1}\hat{H}\hat{U}_1=\hat{H}$ と $\hat{U}_2^{-1}\hat{H}\hat{U}_2=\hat{H}$ を使えば，$(\hat{U}_1\hat{U}_2)^{-1}\hat{H}(\hat{U}_1\hat{U}_2)=\hat{H}$ を示すのは簡単であろう．　■

変換群の第1の例として，例題3で議論したような1次元のパリティを考えよう．パリティ対称性を表す変換群 $\mathscr{S}$ としては，恒等変換1および例題3の(1)で定義したユニタリー変換 $\hat{U}$ の2つの元からなるものを考える．すなわち，

$$\mathscr{S}=\{1,\ \hat{U}\}\tag{7.12}$$

例題3の(2)で示したように，$\hat{U}^2=1$ であるから，$\hat{U}^{-1}=\hat{U}$ であり，$\mathscr{S}$ は明らかに(7.11)の2条件をみたしている．

変換群の第2の例として，例題4で議論したような1次元の並進を考えよう．この場合の対称性を表す変換群$\mathscr{S}$としては，(7.9)で定義される$\hat{U}(c)$ ($c\in\boldsymbol{R}$)の全体を考えればよい．すなわち，

$$\mathscr{S}=\{\hat{U}(c)\,;\,c\in\boldsymbol{R}\} \tag{7.13}$$

$\hat{U}(c)$の定義式(7.9)から容易にわかるように，

$$\hat{U}(c)^{-1}=\hat{U}(-c) \tag{7.14a}$$

$$\hat{U}(c_1)\hat{U}(c_2)=\hat{U}(c_1+c_2) \tag{7.14b}$$

であるから，$\mathscr{S}$はたしかに(7.11)の2条件をみたしている．

変換群の生成子

変換群の単位元の近傍が，いくつかの実数によってパラメトライズできるような状況を考えよう．もう少し具体的にいうと，変換群の元のうち恒等変換に十分近いものは，n個の実数の組$\varepsilon=(\varepsilon^1, \varepsilon^2, \cdots, \varepsilon^n)$によって，

$$\hat{U}(\varepsilon)=1+i\sum_{a=1}^{n}\varepsilon^a\hat{T}_a+O(\varepsilon^2) \tag{7.15}$$

のように一意的に表されると仮定する．

ここで現れた$\hat{T}_a$ ($a=1,2,\cdots,n$)はエルミートな保存量であることに注意しよう．実際，$\hat{U}(\varepsilon)$がユニタリーであることから，

$$\begin{aligned}1&=\hat{U}(\varepsilon)^{\dagger}\hat{U}(\varepsilon)=(1-i\sum_{a=1}^{n}\varepsilon^a\hat{T}_a{}^{\dagger})(1+i\sum_{a=1}^{n}\varepsilon^a\hat{T}_a)+O(\varepsilon^2)\\&=1+i\sum_{a=1}^{n}\varepsilon^a(\hat{T}_a-\hat{T}_a^{\dagger})+O(\varepsilon^2)\end{aligned} \tag{7.16}$$

となるから，$\hat{T}_a-\hat{T}_a^{\dagger}=0$すなわち$\hat{T}_a$がエルミートであることがわかる．また，ハミルトニアン$\hat{H}$が$\hat{U}(\varepsilon)$で不変であることから，

$$\begin{aligned}\hat{H}&=\hat{U}(\varepsilon)^{-1}\hat{H}\hat{U}(\varepsilon)\\&=(1-i\sum_{a=1}^{n}\varepsilon^a\hat{T}_a)\hat{H}(1+i\sum_{a=1}^{n}\varepsilon^a\hat{T}_a)+O(\varepsilon^2)\\&=\hat{H}+i\sum_{a=1}^{n}\varepsilon^a[\hat{H},\hat{T}_a]+O(\varepsilon^2)\end{aligned} \tag{7.17}$$

となるから，$\hat{H}$と$\hat{T}_a$が可換であること，すなわち$\hat{T}_a$が保存量であることがわかる．

このように，連続なパラメーターをもつ変換に対する不変性の結果として現れる保存則には重要なものが多い．実際，次節で述べるように，運動量や角運動量の保存則は空間内での並進および回転に対する不変性の表れである．また，場の理論では，電荷の保存則は場の位相を変えることに対する不変性の結果として記述できる．

恒等変換に非常に近い変換をいくつも合成して，恒等変換から有限だけ離れた変

換をつくることができる．たとえば，n 個の任意の実数 c^a に対して，Nを十分に大きな整数として，$\hat{U}\left(\frac{c}{N}\right)$ をN回かけ合わせたものを考えると，(7.15)より，

$$\begin{aligned}\lim_{N\to\infty}\hat{U}\left(\frac{c}{N}\right)^N &= \lim_{N\to\infty}\left(1+i\sum_{a=1}^{n}\frac{c^a}{N}\hat{T}_a+O\left(\frac{1}{N^2}\right)\right)^N \\ &= \exp\left(i\sum_{a=1}^{n}c^a\hat{T}_a\right)\end{aligned} \tag{7.18}$$

が得られる．このように，単位元の近傍の元は，$\hat{T}_a$ が表す無限小変換，$1+i\sum_{a=1}^{n}\varepsilon^a\hat{T}_a$ を何回も続けることによって得られるので，$\hat{T}_a$ を変換群の生成子とよぶ．

生成子の間の交換子は，生成子の線型結合として書けること，すなわち適当な実係数 $f_{ab}{}^c$ $(a, b, c=1, 2, \cdots, n)$ を使って，

$$[\hat{T}_a, \hat{T}_b]=i\sum_{c=1}^{n}f_{ab}{}^c\hat{T}_c \tag{7.19}$$

と書けることを示そう．そのために，(7.15)で表される $\hat{U}(\varepsilon)$ から，

$$\hat{R}(\varepsilon, \delta)=\hat{U}(\delta)^{-1}\hat{U}(\varepsilon)^{-1}\hat{U}(\delta)\hat{U}(\varepsilon) \tag{7.20}$$

という形のものを作ってみよう．$\hat{U}(0)=1$ であることから，明らかに $\hat{R}(\varepsilon, 0)=1$ および $\hat{R}(0, \delta)=1$ が成り立つから，$\hat{R}(\varepsilon, \delta)$ を ε および δ で Taylor 展開すると，

$$\hat{R}(\varepsilon, \delta)=1+i\sum_{a,b=1}^{n}\varepsilon^a\delta^b\hat{A}_{ab}+O(\varepsilon, \delta\text{ の 3 次}) \tag{7.21}$$

の形になっているはずである．ところが，単位元の近傍の元は(7.15)のような形に表せるとしているから，$\hat{A}_{ab}$ は生成子の線型結合 $\hat{A}_{ab}=\sum_{c=1}^{n}f_{ab}{}^c\hat{T}_c$ と表せるはずであり，けっきょく，

$$\hat{R}(\varepsilon, \delta)=1+i\sum_{a,b,c=1}^{n}\varepsilon^a\delta^b f_{ab}{}^c\hat{T}_c+O(\varepsilon, \delta\text{ の 3 次}) \tag{7.22}$$

と書けることがわかる．

一方，(7.20)の右辺に(7.15)を代入して ε と δ の両方について 1 次の項を具体的に計算すると，それは，

$$\begin{aligned}&-\left[i\sum_{a=1}^{n}\varepsilon^a\hat{T}_a, i\sum_{b=1}^{n}\delta^b\hat{T}_b\right] \\ &=\sum_{a,b=1}^{n}\varepsilon^a\delta^b[\hat{T}_a, \hat{T}_b]\end{aligned} \tag{7.23}$$

に等しいことがわかる．これを(7.22)と比較することにより，(7.19)が示される．けっきょく，変換群が合成および逆変換をとる操作に関して閉じていることから，生成子の交換子が生成子の線型結合であることが導かれた．(7.19)の右辺に現れる

係数 $f_{ab}{}^c$ は変換群の単位元近傍の構造を決めるものであり，構造定数とよばれている．

変換群の生成子の簡単な例として，1 次元の並進全体のなす変換群(7.13)の生成子を求めてみよう．この場合の変換の定義式(7.9)で c が微小量 ε のときを考えると，

$$\begin{aligned}\hat{U}(\varepsilon)|x\rangle &= |x+\varepsilon\rangle = |x\rangle + \varepsilon\frac{\partial}{\partial x}|x\rangle + O(\varepsilon^2) \\ &= \left(1+\varepsilon\frac{1}{i\hbar}\hat{p}\right)|x\rangle + O(\varepsilon^2)\end{aligned} \tag{7.24}$$

となる．ここで，一般の場合の生成子の定義(7.15)を思いだすと，いまの場合の生成子 $\hat{T}$ は運動量 $\hat{p}$ と同一視できることがわかる．7.3 節でみるように，系の全運動量が並進対称性の生成子であるという事実は，きわめて一般的に成り立っている．

空間の一様等方性とユークリッド群

空間は，基本的には一様かつ等方であると思われる．ここで，空間が一様であるとは，空間内のすべての点が対等であるということであり，物理法則が並進に対して不変であることを意味する．そして，空間が等方的であるとは，空間に固有の特別な向きなどはなくて，どの向きも対等であるということ，すなわち，物理法則が回転に対して不変であることを意味する．空間の一様性および等方性の結果として，運動量の保存則と角運動量の保存則が導かれることを以下のいくつかの節で議論していきたい．

そのための準備として，まず，空間が一様等方であるということを初等幾何学的な直観と結びつけた形で述べておこう．3 次元空間に直交座標を導入し，座標 (x, y, z) をもつ点を原点のまわりに，直交行列 M で回転してから，(a, b, c) だけ平行移動するような変換を考えよう．すなわち，

$$\begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} \mapsto \begin{pmatrix} x' \\ y' \\ z' \end{pmatrix} = M\begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} a \\ b \\ c \end{pmatrix} \tag{7.25}$$

ここで，直交行列 M および定数 a, b, c をいろいろな値にとると，いろいろな変換が得られるが，そのような変換全体の集合のことを**ユークリッド群**とよんでいる．それは，ユークリッド幾何学では，このような変換によって移り変わることのできる図形を合同とみなすからである．

ユークリッド群が実際に群の構造をもつこと，すなわち，変換の合成および逆変換に関して閉じていることはつぎの例題 6 のようにしてすぐにわかる．けっきょく，

空間が一様等方であるということは，物理法則がユークリッド群に対応した変換に対して不変であることにほかならない．

例題 6 記号を簡単にするため，(7.25)を

$$\boldsymbol{x} \mapsto \boldsymbol{x}' = M\boldsymbol{x} + \boldsymbol{a} \quad ①$$

と書くことにしよう．

(1) $f(\boldsymbol{x}) = M\boldsymbol{x} + \boldsymbol{a}$ の逆変換を求め，やはり①の形をしていることを確認せよ．

(2) $f_1(\boldsymbol{x}) = M_1\boldsymbol{x} + \boldsymbol{a}_1$ および $f_2(\boldsymbol{x}) = M_2\boldsymbol{x} + \boldsymbol{a}_2$ の合成関数[1] $f_1 \circ f_2$ を①の形に書け．

解 (1) $\boldsymbol{x}' = M\boldsymbol{x} + \boldsymbol{a}$ を $\boldsymbol{x}$ について解くと，

$$\boldsymbol{x} = M^{-1}\boldsymbol{x}' - M^{-1}\boldsymbol{a}$$

となるから，f の逆変換は，

$$f^{-1}(\boldsymbol{x}) = M^{-1}\boldsymbol{x} - (M^{-1}\boldsymbol{a})$$

であり，①の形をしている．

(2)
$$\begin{aligned} f_1 \circ f_2(\boldsymbol{x}) &= f_1(f_2(\boldsymbol{x})) \\ &= f_1(M_2\boldsymbol{x} + \boldsymbol{a}_2) \\ &= M_1(M_2\boldsymbol{x} + \boldsymbol{a}_2) + \boldsymbol{a}_1 \\ &= (M_1M_2)\boldsymbol{x} + (M_1\boldsymbol{a}_2 + \boldsymbol{a}_1) \end{aligned}$$

となり，①の形に書ける． ∎

ところで，量子力学では，一般に対称性とはユニタリー変換からなる変換群に対するハミルトニアンの不変性のことであるのを思いだそう．そうすると，量子力学の立場では，空間が一様等方であるということは，ユークリッド群と同じ構造をもつような変換群があって，ハミルトニアンがそれに関して不変であることを意味しているといってよいだろう．ここで，「…群と同じ構造をもつような…群」というような多少あいまいな表現を使ったが，数学的にいうと群として同型であるという意味である．これらの事情を明らかにするために，群についての基本的なことを次節でまとめることにする．

［問題 1］ 構造定数についてつぎのことを示せ．

(i) 反対称性

$$f_{ab}{}^{c} = -f_{ba}{}^{c}$$

(ii) Jacobi 律

$$\sum_{e=1}^{n} f_{ab}{}^{e} f_{ec}{}^{d} + \sum_{e=1}^{n} f_{bc}{}^{e} f_{ea}{}^{d} + \sum_{e=1}^{n} f_{ca}{}^{e} f_{eb}{}^{d} = 0$$

［解］ (i) $[\hat{T}_a, \hat{T}_b] = -[\hat{T}_b, \hat{T}_a]$ と $f_{ab}{}^{c}$ の定義式(7.19)より明らかである．

---

1) 関数 f_1 と f_2 の合成関数 $f_1(f_2(x))$ を $f_1 \circ f_2$ と書く．

(ii) 一般に，3つの行列 A，B，C に対して，

$$[[A,B],C]+[[B,C],A]+[[C,A],B]=0$$

が成り立つから，$A=\hat{T}_a, B=\hat{T}_b, C=\hat{T}_c$ として，(7.19)を使えばよい．実際，(7.19)を繰り返して使うと，

$$\begin{aligned}[[\hat{T}_a,\hat{T}_b],\hat{T}_c]&=\left[\sum_{e=1}^{n} f_{ab}{}^{e}\hat{T}_e,\ \hat{T}_c\right]\\&=\sum_{e=1}^{n} f_{ab}{}^{e}\sum_{d=1}^{n} f_{ec}{}^{d}\hat{T}_d\\&=\sum_{d=1}^{n}\left(\sum_{e=1}^{n} f_{ab}{}^{e}f_{ec}{}^{d}\right)\hat{T}_d\end{aligned}$$

が得られるが，a，b，c をサイクリックにずらしたものを加え $\hat{T}_d$ の係数をみると求める式が得られる．　▮

7.2　群

群と表現

集合 G の上に積とよばれるある演算∘が定義されていて，つぎの条件をみたすとき，G は演算∘に関して**群**をなすという．すなわち，

(i) 結合律

$$x\circ(y\circ z)=(x\circ y)\circ z \tag{7.26 a}$$

(ii) 単位元の存在

ある元 e があって任意の元 x に対して，

$$e\circ x=x\circ e=x \tag{7.26 b}$$

が成り立つ．

(iii) 逆元の存在

任意の元 x に対して，逆元とよばれる元 x^{-1} が存在して，

$$x\circ x^{-1}=x^{-1}\circ x=e \tag{7.26 c}$$

が成り立つ．

前節で議論した変換群やユークリッド群が，変換の合成をその上での積とみなしたときに，群になっていることは明らかであろう．

群から群への写像で積を保つものを準同形写像という．もう少しくわしくいうと，群 G から群 G' への写像 f で，G の任意の2元 x, y に対して，

$$f(x\circ y)=f(x)\circ f(y) \tag{7.27}$$

が成り立つとき，f は準同形写像であるという．さらに，f が全単射であるとき，f は同形写像であるという．2つの群の間に同形写像が存在するとき，その2つの

群は同形であるという．2つの群が同形であるとは，群としての構造がまったく同じであるということにほかならない．

ベクトル空間V上の線型変換で逆をもつもの全体は，変換の合成を積とみなしたときに明らかに，群になっている．それをV上の一般線型群とよび，$GL(V)$と書く．群Gから$GL(V)$への準同形写像ρのことを，GのV上での**線型表現**という．とくに，ρが単射であるとき，表現ρは忠実であるという．ρが忠実であれば，Gのρによる像$\rho(G)$はGと同形である．すなわち．抽象的な群Gが，V上の線型変換からなる群$\rho(G)$として具体的に表現できたことになる．これが表現という言葉の由来である．Gの各元xのρによる像がすべてユニタリー変換であるとき，ρはユニタリー表現であるといわれる．すなわち，ユニタリー表現とは群の各元をある線型空間上のユニタリー変換として表現することにほかならない．

例題 1 (1) 実数全体からなる集合は，たし算に関して群をなすことを示せ．その群を実数の加法群という．

(2) (7.9)で定義された1次元の並進の演算子$\hat{U}(c)$を考える．

$$\hat{U}(c)|x\rangle = |x+c\rangle \tag{7.9}$$

実数cに$\hat{U}(c)$を対応させる写像ρは，実数の加法群の忠実なユニタリー表現を与えることを示せ．

解 (1) たし算は明らかに結合律をみたす．加法の単位元は0であり，加法に関するxの逆元は$-x$である．

(2) (7.9)を繰り返し使うと，

$$\begin{aligned}\hat{U}(c_1+c_2)|x\rangle &= |x+c_1+c_2\rangle = \hat{U}(c_1)|x+c_2\rangle \\ &= \hat{U}(c_1)\hat{U}(c_2)|x\rangle\end{aligned}$$

が得られるが，これはρが準同形であることを示している．$\hat{U}(c)$はユニタリーであり，$c_1 \neq c_2$ならば$\hat{U}(c_1) \neq \hat{U}(c_2)$であるから，$\rho$は忠実なユニタリー表現である． ∎

ここで導入した用語を使うと，系が群Gに対応する対称性をもつということを量子力学の枠組みのなかで明確に表現できる．すなわち，Gの状態空間上でのユニタリー表現があって，Gの各元に対応するユニタリー変換に対してハミルトニアンが不変であるとき，系はGに対応した対称性をもっていると考えればよい．

このGとしてユークリッド群をとれば，空間の一様等方性が議論できるわけである．しかし，以下でみるように，ユークリッド群のように連続な変数でパラメトライズされている群の線型表現を考えるためには，無限小変換について調べたほうが便利である．そのための準備として，Lie群およびその表現について少しまとめておこう．

Lie 群の生成子

群 G の各元の近傍が n 個の実数によってなめらかにパラメトライズされており，しかも群の演算 $x \circ y$ は x と y の関数としてなめらかであり，逆をとる操作 x^{-1} も x の関数としてなめらかであるとする．このとき，G は n 次元の Lie 群であるといわれる．たとえば，実数が加法に関してなす群は 1 次元の Lie 群であり，ユークリッド群は 6 次元の Lie 群である．Lie 群の単位元のそばの構造を調べるために，以下のようにして生成子を定義する．

まず手はじめに，n 次元 Lie 群 G が線型演算子の集合が積に関してなす群として与えられている場合を考えよう．この場合は，G の単位元とは単位行列 1 のことであり，その近傍は n 個の実数 $\varepsilon=(\varepsilon^1, \varepsilon^2, \cdots, \varepsilon^n)$ によって

$$g_\varepsilon = 1 + \sum_{a=1}^{n} \varepsilon^a \hat{t}_a + O(\varepsilon^2) \tag{7.28}$$

のように書けるはずである．ここでは，$\hat{t}_a$ のエルミート性などは問題にしないが，その点を除くと，(7.28) は，(7.15) で $i\hat{T}_a$ を $\hat{t}_a$ におきかえたものにほかならない．それゆえ，ハミルトニアンや $\hat{T}_a$ のエルミート性に言及した部分を除けば，(7.15) から (7.23) にいたる議論はそのまま成り立つ．実際，(7.18) と同様にして，単位元近傍の元は n 個の実数の組 $c=(c^1, c^2, \cdots, c^n)$ によって，

$$\lim_{N\to\infty} (g_{\frac{c}{N}})^N = \exp\left(\sum_{a=1}^{n} c^a \hat{t}_a\right) \tag{7.29}$$

と書けることがわかる．また，(7.20) から (7.23) へかけての議論をいま適用すると，$\hat{t}_a$ の間の交換子は適当な実係数 $f_{ab}{}^c$ $(a, b, c=1, 2, \cdots, n)$ によって，

$$[\hat{t}_a, \hat{t}_b] = \sum_{c=1}^{n} f_{ab}{}^c \hat{t}_c \tag{7.30}$$

と書けることがわかる．$\hat{t}_a$ $(a=1, 2, \cdots, n)$ を Lie 群 G の生成子とよび，係数 $f_{ab}{}^c$ を G の構造定数とよぶ．

一般の Lie 群では必ずしも G の元が線型演算子であるとは限らない．たとえばユークリッド群では，各元は (7.25) のような非斉次 1 次変換であり線型演算子ではない．しかし以下に示すように，一般の Lie 群 G に対して，あるベクトル空間 V 上の線型演算子のなす群で G と同型なものを作ることができる．それを G と同一視することにすれば，(7.28) 以下の議論が使えることになる．

1)　ここで行う仮定は，Lie 群の定義の一般性を損うものではない．なぜならば，抽象的な Lie 群 G に対しても，G の各元 g を，

$$x \mapsto g \circ x, \quad x \in G$$

という G じしんの上の変換とみなすことができるからである．

実用上の便宜のため，ここでは，Lie 群Gの各元はある空間 M 上の変換として与えられていると仮定しよう（前ページ下脚注参照）．たとえば，ユークリッド群の各元は(7.25)で与えられるような $\boldsymbol{R}^3$ 上の変換である．M の上で定義されたなめらかな実数値関数 $f: M\to\boldsymbol{R}$ 全体のなすベクトル空間を$\mathscr{F}(M)$ とする．G の各元は，M 上の変換 $g: M\to M$ として与えられていると仮定しているが，各 g に対応して，$\mathscr{F}(M)$ 上の線型演算子 $\hat{g}: \mathscr{F}(M)\to\mathscr{F}(M)$ をつぎのように定義しよう．

$$\hat{g}[f]=f\circ g^{-1} \tag{7.31}$$

ここで$\circ$は関数の合成を表す．すなわち，$\hat{g}$の作用は，M 上の実数値関数 $f(x)$ を $f(g^{-1}(x))$ に変換するようなものである．これは，変換後の関数 $\hat{g}[f]$ の $x\in M$ における値は，変換前の関数 f の $g^{-1}(x)\in M$ における値に等しいということである．これはまた，変換後の関数の $g(x)\in M$ における値は，変換前の関数の $x\in M$ における値に等しいといってもよい．すなわち，$\hat{g}$は，はじめ $x\in M$ のところにあった関数値 $f(x)$ を，g の作用で x が移る先の場所 $g(x)\in M$ にもっていく作用にほかならない．このように考えると，g を $\hat{g}$ に写す対応が同型であることはほぼ自明であろう．

このようにして，G の各元を M 上の実数値関数に作用する線型演算子とみなしたとき，その生成子は M 上の1階の微分作用素になることに注意しよう．これをみるために，M 上の点は d 個の座標 $x=(x^1, x^2, \cdots, x^d)$ によって指定されるとし，微小変換 g_ε は，座標値が x の点を座標値が $x+u(x;\varepsilon)$ の点へ動かしているとしよう．とくに，ε が0のときは，g_0 は単位元であるとしているから，$u(x;0)=0$ である．よって，$u=(u^1, u^2, \cdots, u^d)$ の各成分を ε について Taylor 展開すると，

$$u^\mu(x;\varepsilon)=\sum_{a=1}^{n}\varepsilon^a v_a^\mu(x)+O(\varepsilon^2) \tag{7.32}$$

のように書ける．ところで，ε の1次までの精度では，g_ε の逆変換 $g_\varepsilon{}^{-1}$ は x を $x-u(x;\varepsilon)$ に動かすものと考えてよいから，(7.31)は，

$$\begin{aligned}(\hat{g}_\varepsilon[f])(x)&=f(g_\varepsilon{}^{-1}(x))=f(x-u(x;\varepsilon)+O(\varepsilon^2))\\&=f(x)-\sum_{\mu=1}^{d}u^\mu(x;\varepsilon)\frac{\partial}{\partial x^\mu}f(x)+O(\varepsilon^2)\end{aligned} \tag{7.33}$$

と書ける．これは，微分演算子として，

$$\begin{aligned}\hat{g}_\varepsilon&=1-\sum_{\mu=1}^{d}u^\mu(x;\varepsilon)\frac{\partial}{\partial x^\mu}+O(\varepsilon^2)\\&=1-\sum_{a=1}^{n}\varepsilon^a\sum_{\mu=1}^{d}v_a{}^\mu(x)\frac{\partial}{\partial x^\mu}+O(\varepsilon^2)\end{aligned} \tag{7.34}$$

を意味するから，(7.28)と比較すると，生成子が，

$$\hat{t}_a = -\sum_{\mu=1}^{d} v_a{}^{\mu}(x)\frac{\partial}{\partial x^{\mu}} \tag{7.35}$$

で与えられることがわかる．

例題 2　ユークリッド群の生成子およびその間の交換子を求めよ．

解　(i) ユークリッド群の各元は，$M=\boldsymbol{R}^3$ に，

$$\boldsymbol{x} \mapsto \boldsymbol{x} + M\boldsymbol{x} + \boldsymbol{a} \quad (M\text{は直交行列})$$

のように作用している．ところで，原点を通りベクトル $\boldsymbol{\theta}$ に平行な軸のまわりに，角度 $|\boldsymbol{\theta}|$ だけ回転させる作用は，$\boldsymbol{\theta}$ が微小なときには，

$$\boldsymbol{x} \mapsto \boldsymbol{x} + \boldsymbol{\theta} \times \boldsymbol{x} + O(\boldsymbol{\theta}^2)$$

と書けることを思いだそう．これに微小な平行移動 $\boldsymbol{\varepsilon}$ を加えることにより，ユークリッド群の単位元近傍が得られるから，単位元近傍の元 $g_{\boldsymbol{\theta},\boldsymbol{\varepsilon}}$ は，

$$g_{\boldsymbol{\theta},\boldsymbol{\varepsilon}} : \boldsymbol{x} \mapsto \boldsymbol{x} + \boldsymbol{u}(\boldsymbol{x}\,;\,\boldsymbol{\theta},\boldsymbol{\varepsilon})$$

$$\boldsymbol{u}(\boldsymbol{x}\,;\,\boldsymbol{\theta},\boldsymbol{\varepsilon}) = \boldsymbol{\theta}\times\boldsymbol{x} + \boldsymbol{\varepsilon} + O(\boldsymbol{\theta},\boldsymbol{\varepsilon}\text{ の 2 次})$$

のように書けることがわかる．(7.34) をこれに適用すると，$g_{\boldsymbol{\theta},\boldsymbol{\varepsilon}}$ に対応する $\mathscr{F}(M)$ 上の線型変換は，

$$\hat{g}_{\boldsymbol{\theta},\boldsymbol{\varepsilon}} = 1 - \boldsymbol{u}(\boldsymbol{x}\,;\,\boldsymbol{\theta},\boldsymbol{\varepsilon})\cdot\frac{\partial}{\partial \boldsymbol{x}} + O\,(\boldsymbol{\theta},\boldsymbol{\varepsilon}\text{ の 2 次})$$

と書けることがわかる．これに，上で与えられた $\boldsymbol{u}(\boldsymbol{x},\boldsymbol{\theta},\boldsymbol{\varepsilon})$ の形を代入して，

$$\hat{g}_{\boldsymbol{\theta},\boldsymbol{\varepsilon}} = 1 + \boldsymbol{\theta}\cdot\hat{\boldsymbol{R}} + \boldsymbol{\varepsilon}\cdot\hat{\boldsymbol{T}} + O\,(\boldsymbol{\theta},\boldsymbol{\varepsilon}\text{ の 2 次})$$

の形にまとめると，

$$\hat{\boldsymbol{R}} = -\boldsymbol{x}\times\frac{\partial}{\partial \boldsymbol{x}}, \quad \hat{\boldsymbol{T}} = -\frac{\partial}{\partial \boldsymbol{x}} \tag{ⓐ}$$

が得られる．ここで，$\hat{\boldsymbol{R}}$ は無限小回転を表す生成子であり，$\hat{\boldsymbol{T}}$ は無限小並進の生成子である．

(ii) 3 次元空間のベクトル $\boldsymbol{V}$ の成分を V_a $(a=1, 2, 3)$ のように書くと，ⓐは，

$$\hat{R}_a = -\sum_{b,c}\varepsilon_{abc}x_b\frac{\partial}{\partial x_c}, \quad \hat{T}_a = -\frac{\partial}{\partial x_a}$$

と書ける．少し計算することにより，つぎの交換子が得られる．すなわち，

$$\begin{aligned}
[\hat{R}_a, \hat{R}_b] &= \sum_{c=1}^{3}\varepsilon_{abc}\hat{R}_c, \\
[\hat{R}_a, \hat{T}_b] &= \sum_{c=1}^{3}\varepsilon_{abc}\hat{T}_c, \\
[\hat{T}_a, \hat{T}_b] &= 0
\end{aligned} \tag{7.36}$$

■

Lie 環と局所同型

n 次元 Lie 群 G の n 個の生成子 $\hat{t}_a$ $(a=1, 2, \cdots, n)$ は，1 次独立であることに注

意しよう．そうでなければ，単位元の近傍 $\exp\left(\sum_{a=1}^{n} c^a \hat{t}_a\right)$ は，$n-1$ 個以下のパラメーターでパラメトライズできることになり，G が n 次元であったことに矛盾するからである．生成子の実係数の線型結合 $\sum_{a=1}^{n} c^a \hat{t}_a$ 全体のなすベクトル空間を G の **Lie 環**とよび，ドイツ文字 $\mathfrak{g}$ で表す．(7.30)から明らかなように，$\mathfrak{g}$ の 2 つの元 X，Y の交換子 $[X, Y]$ はやはり $\mathfrak{g}$ の元である．

Lie 群 G の単位元近傍の構造は，その Lie 環 $\mathfrak{g}$ によって完全に決まっているといえる．実際，まず第一に，(7.29)のところで述べたように，G の単位元近傍の元は Lie 環の元Xを使って e^X と表せる．つぎに，そのような 2 元 e^X と e^Y の積を考えたいが，そのためには，十分ゼロに近い線型変換 X，Y に対して成り立つ Campbell-Hausdorff の公式

$$e^X e^Y = \exp\left(X + Y + \frac{1}{2}[X, Y] + \frac{1}{12}([X, [X, Y]] + [Y, [Y, X]]) + \cdots\right) \qquad (7.37)$$

を使えばよい(章末問題［2］参照)．重要なことは，右辺の指数関数の肩が，X と Y およびそれらから順次交換子をとって得られるものの線型結合になっていることである．それゆえ，X と Y が Lie 環の元であれば，右辺の指数関数の肩も Lie 環の元であり，それは Lie 環の交換子，すなわち構造定数を与えれば完全に決まる．

単位元近傍の構造が同じであるような 2 つの Lie 群は**局所同型**であるといわれる．厳密にいうと，2 つの Lie 群 G，G' があったとき，それぞれの単位元の近傍 U，U' およびその間の全単射 $f: U \to U'$ をうまくとって，つぎの条件がみたされるときに，G と G' は局所同型であるという．すなわち，

(i) f も f^{-1} もなめらかである．

(ii) $g_1, g_2, g_1 \circ g_2 \in U$ ならば $f(g_1 \circ g_2) = f(g_1) \circ f(g_2)$．

上で議論したことから明らかなように，2 つの Lie 群Gと G' が局所同型であることは，それぞれに対応する Lie 環 $\mathfrak{g}$ と $\mathfrak{g}'$ が同じ構造定数をもつことと等価である．2 つの Lie 群が同型であれば，当然局所同型でもあるが，つぎの例でみるように，局所同型であっても同型とは限らない．

例題 3　3 行 3 列の実直交行列で行列式が 1 であるもの全体のなす群を 3 次元特殊直交群，あるいは回転群といい，$SO(3)$ と書く．また，2 行 2 列のユニタリー行列で行列式が 1 であるもの全体のなす群を 2 次元特殊ユニタリー群といい，$SU(2)$ と書く．

(1) $SO(3)$ の Lie 環の構造を調べよ．

(2) $SU(2)$ の Lie 環の構造を調べよ.

(3) $SO(3)$ と $SU(2)$ は局所同型ではあるが，同型ではないことを示せ.

解　この場合，$SO(3)$ の元も $SU(2)$ の元も，はじめから線型変換として与えられているから，(7.31)のようにしてわざわざ線型変換を構成しなくても，直接に無限小変換を議論できることに注意しよう.

(1) $SO(3)$ の無限小変換を，無限小行列 ε を使って $M=1+\varepsilon$ と表すと，Mが直交行列であることより，

$$1={}^tMM=(1+{}^t\varepsilon)(1+\varepsilon)=1+\varepsilon+{}^t\varepsilon+O(\varepsilon^2)$$

となり，ε が実交代行列であることがわかる．そうすると，ε のトレースは0であるから，

$$\det M=\det(1+\varepsilon)=1+\mathrm{Tr}(\varepsilon)+O(\varepsilon^2)=1+O(\varepsilon^2)$$

は自動的にみたされている．よって，$SO(3)$ の Lie 環は，3行3列の実交代行列全体であることがわかった．その基底として，R_a $(a=1,2,3)$ を，

$$R_1=\begin{pmatrix}0&0&0\\0&0&-1\\0&1&0\end{pmatrix},\quad R_2=\begin{pmatrix}0&0&1\\0&0&0\\-1&0&0\end{pmatrix},\quad R_3=\begin{pmatrix}0&-1&0\\1&0&0\\0&0&0\end{pmatrix} \qquad ⓐ$$

のようにとると，無限小量 θ に対して，$M=1+\theta R_a$ は a 軸のまわりの θ だけの回転を表している．これらの間の交換子を計算すると，

$$[R_a, R_b]=\sum_{c=1}^{3}\varepsilon_{abc}R_c \qquad ⓑ$$

となるが，これは当然ながら例題2で求めた $\hat{R}_a$ の間の交換子と一致している.

(2) $SU(2)$ の無限小変換を，$U=1+\varepsilon$ と書くと，Uがユニタリーであることより，

$$1=U^\dagger U=(1+\varepsilon^\dagger)(1+\varepsilon)=1+(\varepsilon+\varepsilon^\dagger)+O(\varepsilon^2)$$

となり，ε が交代エルミートであることがわかる．また，Uの行列式が1であることから，

$$1=\det U=\det(1+\varepsilon)=1+\mathrm{Tr}\,\varepsilon+O(\varepsilon^2)$$

となり，ε はトレースレスであることがわかる．よって，$SU(2)$ の Lie 環は，2行2列のトレースレス交代エルミート行列全体であることがわかった．それは実係数のベクトル空間として3次元であるが，その基底 R_a' $(a=1,2,3)$ を，

$$R_a'=\frac{-i}{2}\sigma_a \quad (a=1,2,3) \qquad ⓒ$$

と選ぼう．ここで，σ_a $(a=1,2,3)$ は Pauli 行列とよばれているものであり，

$$\sigma_1=\begin{pmatrix}0&1\\1&0\end{pmatrix},\quad \sigma_2=\begin{pmatrix}0&-i\\i&0\end{pmatrix},\quad \sigma_3=\begin{pmatrix}1&0\\0&-1\end{pmatrix}$$

で与えられる．Pauli 行列の性質 $\sigma_a\sigma_b=\delta_{ab}+i\sum_{c=1}^{3}\varepsilon_{abc}\sigma_c$ を使うと，R_a' の間の交換子は容易に計算できて，

$$[R_a', R_b']=\sum_{c=1}^{3}\varepsilon_{abc}R_c' \qquad ⓓ$$

が得られる．

(3) ⓑとⓓを比べると，明らかに 2 つの Lie 環は同じ構造定数をもっているから，$SO(3)$ と $SU(2)$ は局所同型である．実際，θ^a $(a=1,2,3)$ を十分ゼロに近い実数として，$SO(3)$ の元 $\exp\left(\sum_{a=1}^{3}\theta^a R_a\right)$ に $SU(2)$ の元 $\exp\left(\sum_{a=1}^{3}\theta^a R_a'\right)$ を対応させると，局所同型が得られるはずである．

これが大域的な同型には拡張できないことを示すために，十分大きな整数Nに対して，$\exp\left(\frac{2\pi}{N}R_3\right)$ なる $SO(3)$ の元を考えよう．これは，第 3 軸まわりに $\frac{2\pi}{N}$ だけ回転することであるから，これをN回かけたもの $\left(\exp\left(\frac{2\pi}{N}R_3\right)\right)^N=\exp(2\pi R_3)$ は，具体的に計算するまでもなく，明らかに単位元である．ところで，もし上の局所同型が，ある大域的な同型を単位元近傍に制限したものであるとすると，$\left(\exp\left(\frac{2\pi}{N}R_3\right)\right)^N=1$ に対応して，$\left(\exp\left(\frac{2\pi}{N}R_3'\right)\right)^N=1$ が $SU(2)$ で成り立たなければならない．ところが，$R_3'=-\frac{i}{2}\sigma_3$ より具体的に $\left(\exp\left(\frac{2\pi}{N}R_3'\right)\right)^N=\exp(2\pi R_3')$ を求めてみると，これは 1 ではなくて，-1 である．よって，上で考えた局所同型は大域的な同型には拡大できないことがわかった．$SO(3)$ と $SU(2)$ が同型でないことは，それらが異なるトポロジーをもつことからもわかる． ∎

Lie 環の表現

Lie 群Gの生成子 $\hat{t}_a$ $(a=1,2,\cdots,n)$ が構造定数 $f_{ab}{}^c$ をもっていたとする．すなわち，

$$[\hat{t}_a, \hat{t}_b]=\sum_{c=1}^{n}f_{ab}{}^c\hat{t}_c \tag{7.38}$$

あるベクトル空間V上の n 個の線型変換 $\hat{\tau}_a$ $(a=1,2,\cdots,n)$ の間の交換子が，上と同じ $f_{ab}{}^c$ を使って，

$$[\hat{\tau}_a,\ \hat{\tau}_b]=\sum_{c=1}^{n} f_{ab}{}^{c}\hat{\tau}_c \tag{7.39}$$

と書けるとき，$\hat{\tau}_a$ $(a=1,2,\cdots,n)$ を生成子の，あるいはLie環 $\mathfrak{g}$ の V 上での線型表現という．ここでは，$\hat{\tau}_a\,(a=1,2,\cdots,n)$ は必ずしも1次独立でなくてもよいとする．

このとき，G の単位元の近傍の元 $\exp\left(\sum_{a=1}^{n} c^a \hat{t}_a\right)$ に，V 上の線型変換 $\exp\left(\sum_{a=1}^{n} c^a \hat{\tau}_a\right)$ を対応させる写像 ρ_0 を考えよう．このような ρ_0 は G の単位元近傍の局所的な表現になっていること，すなわち，つぎの例題の主張が成り立っていることが，Campbell-Hausdorff の公式(7.37)からわかる．

例題 4　単位元に十分近い G の 2 元 g_1, g_2 に対して，

$$\rho_0(g_1\circ g_2)=\rho_0(g_1)\rho_0(g_2)$$

が成り立つことを示せ．

解　(i) 議論を見通しよくするために，Lie環 $\mathfrak{g}$ の各元 $\sum_{a=1}^{n} c^a \hat{t}_a$ に V 上の線型変換 $\sum_{a=1}^{n} c^a \hat{\tau}_a$ を対応させる写像を σ と書こう．σ は明らかに線型であり，交換子を保っている．すなわち，

$$X\in\mathfrak{g},\ \lambda\in\boldsymbol{R}\quad \text{に対して}\quad \sigma(\lambda X)=\lambda\sigma(X),$$
$$X,\ Y\in\mathfrak{g}\quad \text{に対して}\quad \sigma(X+Y)=\sigma(X)+\sigma(Y),$$
$$X,\ Y\in\mathfrak{g}\quad \text{に対して}\quad \sigma([X,\ Y])=[\sigma(X),\ \sigma(Y)]$$

が成り立っている．また，この σ を使うと，いま考えている写像 ρ_0 は，

$$\rho_0(e^X)=e^{\sigma(X)},\quad X\in\mathfrak{g}$$

と書ける．

(ii) このことから，十分ゼロに近い $\mathfrak{g}$ の 2 元 X，Y に対して，

$$\begin{aligned}
\rho_0(e^X\,e^Y)&=\rho_0\left(e^{X+Y+\frac{1}{2}[X,Y]+\frac{1}{12}[X,[X,Y]]+\cdots}\right)\\
&=e^{\sigma(X+Y+\frac{1}{2}[X,Y]+\frac{1}{12}[X,[X,Y]]+\cdots)}\\
&=e^{\sigma(X)+\sigma(Y)+\frac{1}{2}[\sigma(X),\sigma(Y)]+\frac{1}{12}[\sigma(X),[\sigma(X),\sigma(Y)]]+\cdots}\\
&=e^{\sigma(X)}e^{\sigma(Y)}\\
&=\rho_0(e^X)\rho_0(e^Y)
\end{aligned}$$

が示される．　▮

このように，Lie群 G の単位元近傍の局所的な表現は，対応するLie環の表現から得られる．しかしながら，単位元近傍の局所的な表現が，いつでも大域的な表現に拡大できるとは限らない．ここで，大域的な表現とは，単位元近傍に限らず，G 全

体で定義された表現のことである．実際，例題3でみたように，回転群の単位元近傍の元 $\exp\left(\sum_{a=1}^{3}\theta^a R_a\right)$ に2行2列の行列 $\exp\left(\sum_{a=1}^{3}\theta^a R_a'\right)$ を対応させる写像は，局所的な表現ではあるが，大域的なものに拡大できない．局所的な表現がどのような場合に大域的な表現に拡大されるかを考えるための第一歩として，連結という概念を定義しておこう．

Lie 群 G の元 g と単位元 e を結ぶ G 内の連続曲線が存在するとき，g は単位元とつながっているという．このとき，その連続曲線にそって十分たくさんの点 g_i ($i=0,1,2,\cdots,N$)，すなわち，$g_0=e, g_1, g_2, \cdots, g_N=g$ をとれば，各 i に対して g_{i-1} と g_i が十分近くにあるようにできるはずである．それは，各 i に対して $h_i=g_i\circ g_{i-1}{}^{-1}$ が十分単位元に近いということと同じであるが，

$$g=h_N\circ h_{N-1}\circ h_{N-2}\circ\cdots\circ h_1 \tag{7.40}$$

と書けるから，けっきょく，単位元とつながっている元とは，単位元に近いいくつかの元をかけることによって得られる元のことであるといってよい．Lie 群 G のすべての元が単位元とつながっているとき，G は**連結 Lie 群**であるという．

例題 5　3次元の直交行列全体のなす群を，3次元直交群とよび，$O(3)$ と書く．そのうちで，行列式が1のものだけを考えたものが，回転群 $SO(3)$ であった．

パリティ変換 $\boldsymbol{x}\mapsto-\boldsymbol{x}$ に対応する $O(3)$ の元を $\mathscr{P}$ と書く．すなわち，

$$\mathscr{P}=-1$$

(1) $O(3)$ の任意の元は $SO(3)$ の元であるか，$SO(3)$ の元に $\mathscr{P}$ をかけたものであることを示せ．

(2) $SO(3)$ は連結であるが，$O(3)$ は連結でないことを示せ．

解　(1) $O(3)$ の元 M は ${}^tMM=1$ をみたすから，両辺の行列式をとると $(\det M)^2=1$ が得られる．これから，$\det M=\pm1$ であることがわかる．$\det M=1$ ならば，それは $SO(3)$ の元である．$\det M=-1$ のときは，$M'=\mathscr{P}M=-M$ とすると $\det M'=\det\mathscr{P}\cdot\det M=(-1)^2=1$ をみたし，また，${}^tM'M'=(-1)^2\,{}^tMM=1$ であるから，M' は $SO(3)$ の元である．$M'=\mathscr{P}M$ は $M=\mathscr{P}M'$ と書いても同じである．

(2) $SO(3)$ の任意の元は，ある軸 $\boldsymbol{n}$ のまわりにある角度 θ だけ回転するという形に表される．これは，明らかに，$\boldsymbol{n}$ 軸まわりの微小回転を続けてかければ得られるから，$SO(3)$ は連結である．$O(3)$ で単位元とつながっているものを M とすると，1から M にいたる $O(3)$ 内の連続曲線があるはずである．行列式の値は連続曲線に沿って連続的に変化するはずであるが，直交行列に対しては，行列式は $+1$ か -1 の離散的な値しかとれない．よって，連続曲線に沿って行列式は変化できないことになり，

$\det M=\det 1=1$ を得る．一方，$\det \mathscr{P}=-1$ であるから，これは $\mathscr{P}$ が単位元とつながっていないことを意味する．　∎

ところで，Lie 群 G の大域的な表現とは，G からあるベクトル空間 V 上の一般線型群 $GL(V)$ へのなめらかな写像 ρ であって，つぎの条件をみたすもののことである．

$$\text{任意の } g_1,\ g_2\in G \text{ に対し，}\ \rho(g_1\circ g_2)=\rho(g_1)\rho(g_2) \tag{7.41}$$

一方，G の単位元近傍 U 上で与えられた局所的な表現とは，U から $GL(V)$ へのなめらかな写像 ρ_0 であって，つぎの条件をみたすもののことである．すなわち，

$$g_1, g_2, g_1\circ g_2\in U \text{ ならば } \rho_0(g_1\circ g_2)=\rho_0(g_1)\rho_0(g_2) \tag{7.42}$$

U 上で与えられた局所的な表現 ρ_0 が，ある大域的な表現 ρ を U に制限したものになっているとき，ρ は ρ_0 を大域的に拡大したものであるといおう．

もし，G が連結であれば，(7.40)のところで述べたように，G の任意の元 g は，単位元近傍 U のいくつかの元 $h_1, h_2, \cdots, h_N$ を使って，

$$g=h_N\circ h_{N-1}\circ\cdots\circ h_1 \tag{7.43}$$

と書ける．いま，G の大域的な表現 ρ を U に制限したものを ρ_0 とすると，

$$\begin{aligned}\rho(g)&=\rho(h_N)\rho(h_{N-1})\cdots\rho(h_1)\\&=\rho_0(h_N)\rho_0(h_{N-1})\cdots\rho_0(h_1)\end{aligned} \tag{7.44}$$

となるが，これは，ρ_0 を決めると ρ が決まってしまうことを意味している．すなわち，連結 Lie 群の大域的な表現を与えるためには，局所的な表現を与えれば十分である．しかしながら，任意の局所的な表現が大域的な表現に拡大できるとは限らないことに注意しなければならない．なぜならば，(7.43)のように G の元 g を単位元近傍の元の積として表す方法は無数にあるが，異なる表し方をしたときにも(7.44)から計算される $\rho(g)$ が同じ値であるとは限らないからである．じつは，つぎに示すように，G が単連結といわれる性質をもつときには，$\rho(g)$ は一意的に決まり，局所的な表現を大域的なものに拡大できることがわかる．

単連結 Lie 群の表現

Lie 群 G の 2 つの元 a, b に対し，a を始点とし b を終点とする G 内の道 h を考える．厳密にいえば，h は実数の区間 $I=[0,1]$ から G への連続な写像であり，$h(0)=a, h(1)=b$ をみたすものとする．いま，そのような 2 つの道 h_1 と h_2 が始点と終点を保ったまま連続的に変形できるとき，h_1 と h_2 はホモトープであるといい，$h_1\sim h_2$ と書く．厳密にいうと，G に値をとる 2 変数 t, s $(0\leqq t\leqq 1, 0\leqq s\leqq 1)$ の連続関数 $F(t,s)$ があって，$F(t,0)=h_1(t)$，$F(t,1)=h_2(t)$，$F(0,s)=a$，$F(1,s)=b$ が成り立つとき，h_1 と h_2 はホモトープというのである．同じ始点と同じ終点をもつ 2 つ

の道が常にホモトープであるような連結 Lie 群は，**単連結** であるという．単連結な Lie 群の重要な例として $SU(2)$ があげられる．

例題 6 (1) $SU(2)$ の元は，Pauli 行列 σ_i を使って，

$$U = a_0 1 + i\sum_{i=1}^{3} a_i \sigma_i$$

と書けることを示せ．ここで，a_0, a_1, a_2, a_3 は 2乗 の和が 1 になるような実数である．すなわち，$a_0^2 + a_1^2 + a_2^2 + a_3^2 = 1$.

(2) $SU(2)$ は単連結であることを示せ．

解 (1) $SU(2)$ の元Uを，

$$U = \begin{pmatrix} \alpha & \gamma \\ \beta & \delta \end{pmatrix}$$

と書くと，U がユニタリーであることから，

$$|\alpha|^2 + |\beta|^2 = |\gamma|^2 + |\delta|^2 = 1 \qquad ⓐ$$

$$\alpha^* \gamma + \beta^* \delta = 0 \qquad ⓑ$$

となる．ⓑを γ, δ に対する 1 次方程式とみなして解くと，

$$\gamma = -\lambda\beta^*, \quad \delta = \lambda\alpha^* \qquad ⓑ'$$

という形に書ける．

一方，$\det U$ が 1 であることより，

$$\alpha\delta - \beta\gamma = 1 \qquad ⓒ$$

であるが，これにⓑ′を代入して，ⓐを使うと $\lambda = 1$ であることがわかる．よって，

$$U = \begin{pmatrix} \alpha & -\beta^* \\ \beta & \alpha^* \end{pmatrix}$$

と書けるが，

$$\alpha = a_0 + ia_3, \quad \beta = -a_2 + ia_1$$

とおくと，求める式が得られる．

(2) 上で示したように，$SU(2)$ は 3 次元球面 S_3 と同相である．S_3 が単連結であること，すなわち同じ始点と同じ終点をもつ S_3 の 2 つの道が，連続的な変形によって移りあうことは直観的に明らかであろう． ∎

単連結な Lie 群Gの連結な単位元近傍Uの上に局所的な表現 ρ_0 が与えられているとする．単位元 e を始点とし G の元 g を終点とする道 $p(t)$ $(0 \leqq t \leqq 1)$ が与えられたとき，その道に沿って $GL(V)$ に値をとる t の連続関数 $f(t)$ をつぎのようにして構成しよう．まず，道 p を十分に細かく分割する．すなわち，区間 $I=[0,\ 1]$ 上に $0 = t_0 < t_1 < t_2 < \cdots < t_{N-1} < t_N = 1$ のように十分たくさんの点をとり，各区間 $I_k = [t_{k-1},$

t_k] が十分小さくなるようにする．

t が区間 I_k に属するとき，すなわち，$t_{k-1} \leqq t \leqq t_k$ のとき，$p(t)$ を，

$$p(t)=(p(t)\circ p(t_{k-1})^{-1})\circ(p(t_{k-1})\circ p(t_{k-2})^{-1})\circ\cdots\circ(p(t_2)\circ p(t_1)^{-1})\circ p(t_1) \tag{7.45}$$

のように分解しておき，これに対応する $f(t)$ を，

$$f(t)=\rho_0(p(t)\circ p(t_{k-1})^{-1})\rho_0(p(t_{k-1})\circ p(t_{k-2})^{-1})\cdots\rho_0(p(t_2)\circ p(t_1)^{-1})\rho_0(p(t_1)),$$
$$(t_{k-1} \leqq t \leqq t_k) \tag{7.46}$$

で定義しよう．直観的にいえば，$p(t)$ を (7.45) の右辺のように微小変換の積として表し，各微小変換が V 上に引きおこす線型変換を合成することによって，$f(t)$ を構成したのである．つぎに示すように，じつはこのようにして作られた f は分割が十分細かければ分割のしかたによらずに，道 p だけで決定されることがわかる．

まず，定義式 (7.46) から容易にわかるように，$f(t)$ はつぎの性質をみたしている．

(i) $f(0)=1$ (V の恒等変換)

(ii) t と t' が十分に近いとき，$f(t)f(t')^{-1}=\rho_0(p(t)\circ p(t')^{-1})$　(7.47)

実際，(i)は定義より自明であるし，(ii)は t と t' が同じ I_k に属するときと，となりあった I_k，I_{k+1} に属するときに分けて考えればすぐに示せる．つぎに，(i)，(ii)をそれぞれ $f(t)$ の初期値，および t を少し増加させたときの $f(t)$ の変化を与えるものとみなせば明らかなように，(i)，(ii)をみたす連続関数 $f: I \to GL(V)$ は一意的に定まる．すなわち，f は性質(i)，(ii)により完全に規定されており，分割 $t_1, \cdots, t_{N-1}$ のとり方には依存しないことがわかった．道の終点 g に対応する f の値 $f(1)$ のことを，道 p に沿って構成した g の表現とよぶことにしよう．

つぎに，e と g を結ぶ道 $p(t)$ を途中の微小な区間 $[a, b]$ で微小に変形して $p_1(t)$ になったとしよう．すなわち，a と b を $0<a<b<1$ であるようなたがいに十分近い数として，$0 \leqq t \leqq a$ または $b \leqq t \leqq 1$ のときは $p_1(t)=p(t)$ であり，$a \leqq t \leqq b$ のときは $p_1(t)$ と $p(t)$ は等しいとは限らないが，たがいに十分近いとする．この変形に対応して，$f(t)$ が $f_1(t)$ に変形されたとすると，$f_1(t)$ が $f(t)$ と異なった値をとるのは区間 $[a, b]$ の上だけであることがわかる．なぜならば，上に述べたように，性質(ii)は t の値を少し変化させたときの $f(t)$ の変化を与えているが，これを繰り返し適用すればわかるように，$t''>t'$ に対して，$f(t'')f(t')^{-1}$ の値は，区間 $[t', t'']$ における $p(t)$ の値だけで決まる．よって，

$$f(t)=f_1(t) \qquad , \qquad 0 \leqq t \leqq a \tag{7.48 a}$$
$$f(t)f(b)^{-1}=f_1(t)f_1(b)^{-1}, \qquad b \leqq t \leqq 1 \tag{7.48 b}$$

が成り立つはずである．一方，a と b は十分に近く，しかも道 $p(t)$ の変形は微小であるとしているから，性質(ii)は f にも f_1 にも適用できる．すなわち，

$$f(b)f(a)^{-1}=\rho_0(p(b)\circ p(a)^{-1}) \tag{7.49 a}$$

$$f_1(b)f_1(a)^{-1}=\rho_0(p(b)\circ p(a)^{-1}) \tag{7.49 b}$$

これと，(7.48 a) より，$f_1(b)=f(b)$ が得られ，さらに (7.48 b) より，$f(t)=f_1(t)$ が $b\leqq t\leqq 1$ でも成り立つことがわかる．

とくに，道の終点 g に対応する f の値 $f(1)$ は道を微小に変形しても変化を受けない．ところで，道の連続変形は上のような微小変形を繰り返し作用させると得られるから，けっきょく，単位元 e と g を結ぶ2つの道 p_1 と p_2 がホモトープであれば，それらの道に沿って構成した g の表現は等しいことが示された．それゆえ，Lie 群 G が単連結であれば，同じ始点と同じ終点をもつ任意の道はたがいにホモトープだから，g の表現が道に依存せずに一意的に決められることがわかる．このようにして，単連結 Lie 群においては，任意の局所的な表現を大域的な表現に拡大することができる．この意味で，単連結 Lie 群の表現を調べるという問題は，その Lie 環の表現を調べるという問題に完全に帰着されるわけである．

7.3　運動量と角運動量

空間の一様・等方性とは，空間に特別な場所や方向がないということであり，それは孤立系のハミルトニアンがユークリッド群に対して不変であることを意味している．ここで，孤立系とは，十分に他の物質から離れていて，それらから受ける力を無視できるような系のことである．いま，N 個の粒子からなる孤立系を考え，各粒子の位置および運動量を，$\boldsymbol{r}_i$，$\boldsymbol{p}_i$ $(i=1,2,\cdots,N)$ としよう．このような系に回転および並進を施すと，それらの変数は古典論的には，

$$\begin{aligned}\boldsymbol{r}_i &\mapsto M\boldsymbol{r}_i+\boldsymbol{a},\\ \boldsymbol{p}_i &\mapsto M\boldsymbol{p}_i\end{aligned}\qquad (i=1,2,\cdots,N) \tag{7.50}$$

のように変化する．ここで，M は直交行列であり，$\boldsymbol{a}$ は定ベクトルである．

量子力学で，これに相当する変換を考えるために，つぎのようなユニタリー演算子 $\hat{U}(M,\boldsymbol{a})$ を導入しよう．すなわち，

$$\begin{aligned}\hat{U}(M,\boldsymbol{a})^\dagger\hat{\boldsymbol{r}}_i\hat{U}(M,\boldsymbol{a})&=M\hat{\boldsymbol{r}}_i+\boldsymbol{a},\\ \hat{U}(M,\boldsymbol{a})^\dagger\hat{\boldsymbol{p}}_i\hat{U}(M,\boldsymbol{a})&=M\hat{\boldsymbol{p}}_i\end{aligned}\qquad (i=1,2,\cdots,N) \tag{7.51}$$

そうすると状態ベクトル $|\psi\rangle$ を $\hat{U}(M,\boldsymbol{a})|\psi\rangle$ に写すユニタリー変換を考えると，(7.50) が期待値の意味で成り立っていることはすぐにわかる．実際，変換 $|\psi\rangle\mapsto\hat{U}(M,\boldsymbol{a})|\psi\rangle$ に対して，$\hat{\boldsymbol{r}}_i$，$\hat{\boldsymbol{p}}_i$ の期待値は，

$$\begin{aligned}\langle\psi|\hat{\boldsymbol{r}}_i|\psi\rangle&\mapsto\langle\psi|\hat{U}(M,\boldsymbol{a})^\dagger\hat{\boldsymbol{r}}_i\hat{U}(M,\boldsymbol{a})|\psi\rangle\\ &=M\langle\psi|\hat{\boldsymbol{r}}_i|\psi\rangle+\boldsymbol{a}\langle\psi|\psi\rangle,\end{aligned}$$

$$\langle\psi|\hat{\boldsymbol{p}}_i|\psi\rangle\mapsto\langle\psi|\hat{U}(M,\boldsymbol{a})^\dagger\hat{\boldsymbol{p}}_i\hat{U}(M,\boldsymbol{a})|\psi\rangle$$
$$=M\langle\psi|\hat{\boldsymbol{p}}_i|\psi\rangle \tag{7.52}$$

のように変化する．

具体的に，(7.51)をみたす $\hat{U}(M,\boldsymbol{a})$ を構成するために無限小変換を考えよう．まず，無限小ベクトル $\boldsymbol{\theta}$ に対応する無限小回転を表す直交行列 $M(\boldsymbol{\theta})$ とは，

$$M(\boldsymbol{\theta})\boldsymbol{x}=\boldsymbol{x}+\boldsymbol{\theta}\times\boldsymbol{x}+O(\boldsymbol{\theta}^2) \tag{7.53}$$

のことであるとしよう．そして，無限小ベクトル $\boldsymbol{\theta},\boldsymbol{\varepsilon}$ に対して，

$$\hat{U}(M(\boldsymbol{\theta}),\boldsymbol{\varepsilon})=1+\frac{1}{i\hbar}\boldsymbol{\theta}\cdot\hat{\boldsymbol{J}}+\frac{1}{i\hbar}\boldsymbol{\varepsilon}\cdot\hat{\boldsymbol{P}}$$
$$+O\ (\boldsymbol{\theta},\boldsymbol{\varepsilon}\text{ の 2 次}) \tag{7.54}$$

とおこう．$\hat{\boldsymbol{P}},\hat{\boldsymbol{J}}$ は並進および回転の生成子であり，$\hat{U}(M(\boldsymbol{\theta}),\boldsymbol{\varepsilon})$ がユニタリーであるためには，それらはエルミートでなければならない．(7.51)で M，$\boldsymbol{a}$ をそれぞれ $M(\boldsymbol{\theta}),\boldsymbol{\varepsilon}$ におきかえたものを考え，左辺に(7.54)を使い，右辺に(7.53)を使って，$\boldsymbol{\varepsilon}$，$\boldsymbol{\theta}$ の1次の項を比較すると，

$$\frac{1}{i\hbar}[\hat{\boldsymbol{r}}_i,\boldsymbol{\varepsilon}\cdot\hat{\boldsymbol{P}}]=\boldsymbol{\varepsilon},\qquad \frac{1}{i\hbar}[\hat{\boldsymbol{p}}_i,\boldsymbol{\varepsilon}\cdot\hat{\boldsymbol{P}}]=\boldsymbol{0}$$
$$\frac{1}{i\hbar}[\hat{\boldsymbol{r}}_i,\boldsymbol{\theta}\cdot\hat{\boldsymbol{J}}]=\boldsymbol{\theta}\times\hat{\boldsymbol{r}}_i,\qquad \frac{1}{i\hbar}[\hat{\boldsymbol{p}}_i,\boldsymbol{\theta}\cdot\hat{\boldsymbol{J}}]=\boldsymbol{\theta}\times\hat{\boldsymbol{p}}_i \tag{7.55}$$

が得られる．これは，3次元ベクトルの成分を陽に書くと，

$$\frac{1}{i\hbar}[\hat{r}_i^a,\hat{P}^b]=\delta^{ab},\qquad \frac{1}{i\hbar}[\hat{p}_i^a,\hat{P}^b]=0$$
$$\frac{1}{i\hbar}[\hat{r}_i^a,\hat{J}^b]=\sum_{c=1}^{3}\varepsilon^{abc}\hat{r}_i^c,\qquad \frac{1}{i\hbar}[\hat{p}_i^a,\hat{J}^b]=\sum_{c=1}^{3}\varepsilon^{abc}\hat{p}_i^c \tag{7.56}$$

とも書ける．

この式をみたすような $\hat{\boldsymbol{P}},\hat{\boldsymbol{J}}$ にはどの程度の不定性があるか考えてみよう．(7.56)をみたす $\hat{\boldsymbol{P}},\hat{\boldsymbol{J}}$ が2組あったとすると，それらの差 $\varDelta\hat{\boldsymbol{P}},\varDelta\hat{\boldsymbol{J}}$ は $\hat{r}_i^a$ とも $\hat{p}_i^a$ とも可換でなければならない．もし，系を記述するために必要な変数が $\hat{\boldsymbol{r}}_i,\hat{\boldsymbol{p}}_i$ 以外になければ，これらのすべてと可換なものはスカラー行列しかないので $\hat{\boldsymbol{P}},\hat{\boldsymbol{J}}$ は本質的には一意的であるといってよい．一方，7.5節で議論するように，系がスピンの自由度をもてば，$\hat{\boldsymbol{J}}$ は(7.56)だけからは決まらない．ここでは，しばらくの間，系は $\hat{\boldsymbol{r}}_i,\hat{\boldsymbol{p}}_i$ によって完全に記述されているとしよう．

$\hat{\boldsymbol{P}},\hat{\boldsymbol{J}}$ として，

$$\hat{\boldsymbol{P}}=\sum_{i=1}^{N}\hat{\boldsymbol{p}}_i, \tag{7.57 a}$$

$$\hat{\boldsymbol{J}}=\sum_{i=1}^{N}\hat{\boldsymbol{r}}_i\times\hat{\boldsymbol{p}}_i \tag{7.57 b}$$

をとってみると，(7.56)がみたされていることは容易にチェックできる．ここで，$\hat{\boldsymbol{P}}, \hat{\boldsymbol{J}}$ がそれぞれ，N 個の粒子のもつ全運動量および全角運動量になっていることに注意しよう．すなわち，全運動量および全角運動量はそれぞれ並進および回転の生成子であり，それらが保存するのは，空間の一様・等方性の帰結であることがわかった．

つぎに，(7.57)で与えられる $\hat{\boldsymbol{P}}, \hat{\boldsymbol{J}}$ の間の交換関係を考えよう．簡単な計算により，

$$[\hat{J}^a, \hat{J}^b]=i\hbar\sum_{c=1}^{3}\varepsilon^{abc}\hat{J}^c \tag{7.58 a}$$

$$[\hat{J}^a, \hat{P}^b]=i\hbar\sum_{c=1}^{3}\varepsilon^{abc}\hat{P}^c \tag{7.58 b}$$

$$[\hat{P}^a, \hat{P}^b]=0 \tag{7.58 c}$$

であることがわかるが，これはユークリッド群の生成子の間の交換関係(7.36)で $\hat{R}_a, \hat{T}_b$ を $\frac{1}{i\hbar}\hat{J}^a, \frac{1}{i\hbar}\hat{P}^a$ におきかえたものと一致していることに注意しよう．すなわち，$\hat{J}^a, \hat{P}^a$ はユークリッド群の生成子の状態空間上での表現にほかならない．このような事情は，(7.57)で与えられた $\hat{J}^a, \hat{P}^a$ を座標表示の波動関数に働く微分演算子として表示すればいっそう明らかになる．実際，座標表示では，(7.57)は，

$$\frac{1}{i\hbar}\hat{\boldsymbol{P}}=-\sum_{i=1}^{N}\frac{\partial}{\partial\boldsymbol{r}_i} \tag{7.59 a}$$

$$\frac{1}{i\hbar}\hat{\boldsymbol{J}}=-\sum_{i=1}^{N}\boldsymbol{r}_i\times\frac{\partial}{\partial\boldsymbol{r}_i} \tag{7.59 b}$$

と書けるが，とくに $N=1$ の場合が，例題 2 で与えた $\hat{\boldsymbol{T}}, \hat{\boldsymbol{R}}$ にほかならない．

ここでは，(7.57)から出発して(7.58)の交換関係を導いたが，(7.58)はずっと一般に成り立つべきものであることに注意しよう．実際，$\hat{\boldsymbol{P}}$ および $\hat{\boldsymbol{J}}$ が並進および回転の生成子であるということは，それらがユークリッド群の生成子の表現になっているということであり，それは(7.58)が成り立つことにほかならない．

パリティ変換

(7.51)の形の変換のうち，$\det M=1$ であるようなものは，無限小変換(7.54)を繰り返し施すことによって得られる．それは，$\det M=1$ であるような直交行列は純粋な回転であり，無限小回転を続けることによって作ることができるからである．よって，系が，無限小変換(7.54)に対して不変であることを要求すれば，その不変性は自動的にユークリッド群の元のうち $\det M=1$ であるものにまで拡大される．ここ

までに議論してきたように，このような不変性は，全運動量および全角運動量の保存を意味しており，経験的にも疑う余地はない．

ところで，7.2 節の例題 5 で示したように，$\det M=-1$ であるような直交行列は，パリティ変換 $\mathscr{P}: \boldsymbol{x} \mapsto -\boldsymbol{x}$ と純粋な回転の合成として表せる．よって，もし系が無限小変換(7.54)に加えて，パリティ変換に対する不変性をもてば，ユークリッド群全体に対する不変性をもつことになる．パリティ変換を表すユニタリー演算子を $\hat{\mathscr{P}}$ と書くことにすると，それは(7.51)で $M=-1$，$\boldsymbol{a}=\boldsymbol{0}$ とおいたものになっているはずである．すなわち，

$$\begin{aligned} \hat{\mathscr{P}}^{-1}\hat{\boldsymbol{r}}_i\hat{\mathscr{P}} &= -\hat{\boldsymbol{r}}_i, \\ \hat{\mathscr{P}}^{-1}\hat{\boldsymbol{p}}_i\hat{\mathscr{P}} &= -\hat{\boldsymbol{p}}_i \end{aligned} \qquad (i=1,2,\cdots,N) \tag{7.60}$$

系が $\hat{\boldsymbol{r}}_i, \hat{\boldsymbol{p}}_i$ で完全に記述されている場合は，$\hat{\mathscr{P}}$ として

$$\hat{\mathscr{P}}|\boldsymbol{r}_1,\cdots,\boldsymbol{r}_N\rangle = |-\boldsymbol{r}_1,\cdots,-\boldsymbol{r}_N\rangle \tag{7.61}$$

で定義されるものをとれば，明らかに(7.60)をみたしている．

自然法則が無限小の回転および並進に対して不変であることは，現在知られているかぎり完全に成り立っている．一方，自然は，パリティに対する不変性をもっていないことが弱い相互作用の研究から知られている．しかしながら，電磁相互作用や強い相互作用はパリティに対して不変であるため，原子物理や物性物理の範囲ではパリティの破れはほとんどみえない．

例題　パリティ演算子 $\hat{\mathscr{P}}$ と $\hat{\boldsymbol{P}}, \hat{\boldsymbol{J}}$ の間の交換関係を調べよ．

解　ユークリッド群の元 $g(M,\boldsymbol{a})$ とは，変換

$$g(M,\boldsymbol{a}): \boldsymbol{x} \mapsto M\boldsymbol{x}+\boldsymbol{a}$$

のことであるとする．とくに，パリティ $\mathscr{P}$ は $M=-1$，$\boldsymbol{a}=\boldsymbol{0}$ の場合であり，

$$\mathscr{P}: \boldsymbol{x} \mapsto -\boldsymbol{x}$$

という変換を表している．合成変換 $\mathscr{P}^{-1}g(M,\boldsymbol{a})\mathscr{P}$ を考えると，

$$\boldsymbol{x} \underset{\mathscr{P}}{\mapsto} -\boldsymbol{x} \underset{g(M,\boldsymbol{a})}{\mapsto} -M\boldsymbol{x}+\boldsymbol{a} \underset{\mathscr{P}^{-1}}{\mapsto} M\boldsymbol{x}-\boldsymbol{a}$$

であるから，

$$\mathscr{P}^{-1}g(M,\boldsymbol{a})\mathscr{P} = g(M,-\boldsymbol{a}) \qquad ⓐ$$

であることがわかる．すなわち，パリティ $\mathscr{P}$ による相似変換を施すと，並進は符号を変えるが，回転はそのままである．$\mathscr{P}$ を状態空間上で表現したものが $\hat{\mathscr{P}}$ であるから，これは，

$$\begin{aligned} \hat{\mathscr{P}}^{-1}\hat{\boldsymbol{P}}\hat{\mathscr{P}} &= -\hat{\boldsymbol{P}}, \\ \hat{\mathscr{P}}^{-1}\hat{\boldsymbol{J}}\hat{\mathscr{P}} &= \hat{\boldsymbol{J}} \end{aligned} \qquad ⓑ$$

を意味する．$\hat{\boldsymbol{P}}, \hat{\boldsymbol{J}}$ が(7.57)のように与えられているときは，(7.60)を使えば，ⓑが成り立っていることは明らかであろう． ▮

一般に，パリティ変換に対して符号を変えるようなベクトルを真性ベクトルとよび，符号を変えないようなベクトルを擬ベクトルとよぶ．上の例題の結果は，全運動量は真性ベクトルであり，全角運動量は擬ベクトルであることを示している．

[問題 2]　N 個の粒子からなる系のハミルトニアンとして，

$$\hat{H}=\sum_{i=1}^{N}\frac{1}{2m_i}\hat{\boldsymbol{p}}_i^2+V(\hat{\boldsymbol{r}}_1, \hat{\boldsymbol{r}}_2, \cdots, \hat{\boldsymbol{r}}_N)$$

の形のものを考える．

(1) 運動量が保存するのはどのような場合か．

(2) 角運動量が保存するのはどのような場合か．

(3) パリティが保存するのはどのような場合か．運動量と角運動量は保存するが，パリティは保存しない例を作れ．

[解]　(1) 系が並進に対して不変なとき運動量が保存する．それは，

$$V(\boldsymbol{r}_1+\boldsymbol{a}, \boldsymbol{r}_2+\boldsymbol{a}, \cdots, \boldsymbol{r}_N+\boldsymbol{a})=V(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2, \cdots, \boldsymbol{r}_N)$$

が成り立つということであり，いいかえると，V が $\boldsymbol{r}_i\,(i=1,2,\cdots,N)$ の間の差にだけ依存しているということである．

(2) 系が原点のまわりの回転に対して不変なときに，原点のまわりの角運動量が保存する．それは3次元ベクトルの回転を表す行列 $R(\boldsymbol{\theta})$ に対して，

$$V(R(\boldsymbol{\theta})\boldsymbol{r}_1, R(\boldsymbol{\theta})\boldsymbol{r}_2, \cdots, R(\boldsymbol{\theta})\boldsymbol{r}_N)=V(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2, \cdots, \boldsymbol{r}_N)$$

が成り立つということである．

(3) パリティが保存するのは，

$$V(-\boldsymbol{r}_1, -\boldsymbol{r}_2, \cdots, -\boldsymbol{r}_N)=V(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2, \cdots, \boldsymbol{r}_N)$$

が成り立つときである．

$N=4$ のときにつぎのようなハミルトニアンを考えると，運動量と角運動量は保存するが，パリティは保存しないことは明らかであろう．

$$\hat{H}=\sum_{i=1}^{4}\frac{1}{2m_i}\hat{\boldsymbol{p}}_i{}^2+\lambda\frac{(\boldsymbol{r}_1-\boldsymbol{r}_4)\cdot\{(\boldsymbol{r}_2-\boldsymbol{r}_4)\times(\boldsymbol{r}_3-\boldsymbol{r}_4)\}}{(\boldsymbol{r}_1-\boldsymbol{r}_4)^2(\boldsymbol{r}_2-\boldsymbol{r}_4)^2(\boldsymbol{r}_3-\boldsymbol{r}_4)^2}$$

ここで，右辺第2項の分母は，粒子がおたがいに十分離れているときにはポテンシャルエネルギーがゼロになるようにするために導入しただけであり，深い意味はない． ▮

7.4　角運動量の固有状態

角運動量の演算子 $\hat{\boldsymbol{J}}$ が状態空間 V にどのような形で作用しているか，一般的に議論しておこう．ここでは，$\hat{\boldsymbol{J}}$ が交換関係

$$[\hat{J}^a, \hat{J}^b] = i\hbar \sum_{c=1}^{3} \varepsilon^{abc} \hat{J}^c \tag{7.58 a}$$

をみたすエルミート演算子であることだけを仮定する．まず，わずらわしさを避けるために Planck 定数 を因子化して，

$$\hat{\boldsymbol{J}} = \hbar \hat{\boldsymbol{j}} \tag{7.62}$$

とおこう．そうすると，上の交換関係(7.58a)は，

$$[\hat{j}^a, \hat{j}^b] = i \sum_{c=1}^{3} \varepsilon^{abc} \hat{j}^c \tag{7.63}$$

となり，以下の議論には，$\hbar$ は現れなくてすむ．

$\hat{\boldsymbol{j}}$ の 3 つの成分はおたがいに可換ではないから，同時に対角化することはできないが，$\hat{\boldsymbol{j}}$ はエルミートであるから，1 つの成分だけならいつでも対角化できるはずである．ここでは $\hat{j}^3$ を対角化することにしよう．$\hat{j}^3$ を対角化する基底に対して，$\hat{j}^1$，$\hat{j}^2$ がどのように作用するかを調べるために，昇降演算子 $\hat{j}^+$, $\hat{j}^-$ を次式で定義しよう．

$$\hat{j}^+ = \hat{j}^1 + i\hat{j}^2 \tag{7.64 a}$$

$$\hat{j}^- = \hat{j}^1 - i\hat{j}^2 \tag{7.64 b}$$

交換関係(7.63)は，$\hat{j}^3, \hat{j}^\pm$ を使って書きなおすと，

$$[\hat{j}^3, \hat{j}^+] = \hat{j}^+ \tag{7.65 a}$$

$$[\hat{j}^3, \hat{j}^-] = -\hat{j}^- \tag{7.65 b}$$

$$[\hat{j}^+, \hat{j}^-] = 2\hat{j}^3 \tag{7.65 c}$$

となるが，はじめの 2 つの式は，$\hat{j}^\pm$ が $\hat{j}^3$ の固有値を 1 だけ増減させる演算子であることを示している．

つぎに $\hat{\boldsymbol{j}}$ の大きさの 2 乗，すなわちつぎの演算子

$$\hat{\boldsymbol{j}}^2 = \sum_{a=1}^{3} (\hat{j}^a)^2 = (\hat{j}^1)^2 + (\hat{j}^2)^2 + (\hat{j}^3)^2 \tag{7.66}$$

を考える．交換関係(7.63)からすぐに確かめられるように $\hat{\boldsymbol{j}}^2$ は $\hat{\boldsymbol{j}}$ の 3 つの成分と可換である[1)]．

$$[\hat{\boldsymbol{j}}^2, \hat{j}^a] = 0 \quad (a = 1, 2, 3) \tag{7.67}$$

とくに，$\hat{\boldsymbol{j}}^2$ と $\hat{j}^3$ は可換であり，同時に対角化することができる．また，(7.67) より

1)　物理的には，$\hat{j}^a$ は a 軸まわりの回転の生成子であるから，(7.67) は $\hat{\boldsymbol{j}}^2$ が回転に対して不変，すなわちスカラー量であることを示しているにすぎない．

昇降演算子は $\hat{\boldsymbol{j}}^2$ の固有値を変えないことがわかる．すなわち，

$$[\hat{\boldsymbol{j}}^2, \hat{j}^{\pm}]=0 \tag{7.68}$$

である．

昇降演算子と $\hat{j}^3$ を使って $\hat{\boldsymbol{j}}^2$ を書きなおすと，

$$\hat{\boldsymbol{j}}^2=\frac{1}{2}(\hat{j}^+\hat{j}^-+\hat{j}^-\hat{j}^+)+(\hat{j}^3)^2 \tag{7.69}$$

となるが，右辺に現れる $\hat{j}^+\hat{j}^-+\hat{j}^-\hat{j}^+$ の期待値は常に正か 0 であるから，$\hat{\boldsymbol{j}}^2$ の固有値は $\hat{j}^3$ の固有値の 2 乗より大きいか等しいことがわかる．いいかえると，$\hat{\boldsymbol{j}}^2$ の固有値が定まっているような状態がとりうる $\hat{j}^3$ の値は，上からも下からもおさえられている．とくに，$\hat{\boldsymbol{j}}^2$ のそれぞれの固有値に対してそれに属する固有状態のうちで，$\hat{j}^3$ の固有値が最大のものが存在する．ところが，$\hat{j}^+$ は $\hat{\boldsymbol{j}}^2$ の固有値を変えずに，$\hat{j}^3$ の固有値を 1 だけ増加させる演算子であったから，$\hat{j}^+$ をそのような状態に作用させると 0 になるはずである．

そのような状態ベクトルを $|\psi\rangle$ とし，その $\hat{j}^3$ の固有値を j としよう．すなわち，

$$\hat{j}^+|\psi\rangle=0 \tag{7.70 a}$$

$$\hat{j}^3|\psi\rangle=j|\psi\rangle \tag{7.70 b}$$

とする．このとき，$|\psi\rangle$ の $\hat{\boldsymbol{j}}^2$ の固有値は $j(j+1)$ に等しいことが次のようにしてわかる．まず，(7.69) と (7.65 c) より，$\hat{\boldsymbol{j}}^2$ は，

$$\hat{\boldsymbol{j}}^2=\hat{j}^3(\hat{j}^3+1)+\hat{j}^-\hat{j}^+ \tag{7.71}$$

と書けるが，この両辺を $|\psi\rangle$ に作用させて (7.70) を使うと，ただちに，

$$\hat{\boldsymbol{j}}^2|\psi\rangle=j(j+1)|\psi\rangle \tag{7.72}$$

が得られる．

$|\psi\rangle$ に順次 $\hat{j}^-$ を作用して得られる系列 $|\psi\rangle, \hat{j}^-|\psi\rangle, (\hat{j}^-)^2|\psi\rangle, \cdots$ を考えよう．$\hat{j}^-$ は $\hat{\boldsymbol{j}}^2$ の固有値は不変に保つが，$\hat{j}^3$ の固有値を 1 だけ減らすことを思いだすと，この系列の $\hat{\boldsymbol{j}}^2$ の固有値はどれも $j(j+1)$ であり，$\hat{j}^3$ の固有値は $j, j-1, j-2, \cdots$ という具合に 1 ずつ小さくなることがわかる．ところが，(7.69) のすぐあとで議論したように，$\hat{j}^3$ の固有値の 2 乗は $\hat{\boldsymbol{j}}^2$ の固有値を超えることはない．すなわち，いま考えている系列は実際は有限で切れているはずである．いいかえると，ある正の整数 k があって，

$$(\hat{j}^-)^{k-1}|\psi\rangle\neq 0 \tag{7.73 a}$$

$$(\hat{j}^-)^{k}|\psi\rangle=0 \tag{7.73 b}$$

が成り立っている．$|\psi\rangle, \hat{j}^-|\psi\rangle, \cdots, (\hat{j}^-)^{k-1}|\psi\rangle$ のそれぞれに正の規格化因子をかけて 1 に規格化したものを，順に，

$$|j, j\rangle, |j, j-1\rangle, \cdots, |j, j-k+1\rangle \tag{7.74}$$

と書こう．ここでケット記号のなかの1番目の数 j は $\hat{\boldsymbol{j}}^2$ の固有値が $j(j+1)$ に等しいことを表しており，2番目の数は $\hat{j}^3$ の固有値を表している．(7.74)の各状態ベクトルは $\hat{j}^3$ の異なる固有値に属しているから，明らかにおたがいに直交している．また，最後の状態ベクトル $|j, j-k+1\rangle$ は $\hat{j}^-$ で消されること，すなわち，

$$\hat{j}^-|j, j-k+1\rangle = 0 \tag{7.75}$$

に注意しよう．

ここで，(7.69)と(7.65c)を使って，$\hat{\boldsymbol{j}}^2$ を，

$$\hat{\boldsymbol{j}}^2 = \hat{j}^3(\hat{j}^3-1) + \hat{j}^+\hat{j}^- \tag{7.76}$$

と書きかえておいて，この両辺を $|j,\ j-k+1\rangle$ に作用させてみよう．(7.75)に注意すると，右辺第2項はゼロとなり，

$$j(j+1) = (j-k+1)\{(j-k+1)-1\} \tag{7.77}$$

が得られる．これは k に関する2次式であるが，$k>0$ に注意すると，

$$k = 2j+1 \tag{7.78}$$

でなければならないことがわかる．すなわち，(7.74)の系列における $\hat{j}^3$ の固有値は，j から $-j$ まで1ずつ変化することがわかった．また，k は正の整数であったから，(7.78)より j は正か0の整数，または半整数であることがわかる．

つぎに，$|j, m\rangle$ $(m=j, j-1, \cdots, -j)$ に対する $\hat{\boldsymbol{j}}$ の作用を具体的に書きくだしてみよう．まず，明らかに，

$$\hat{j}^3|j, m\rangle = m|j, m\rangle \tag{7.79}$$

である．また，(7.74)で行った $|j,\ m\rangle$ の定義を思いだすと，c_m を正の定数として，

$$\hat{j}^-|j, m\rangle = c_m|j, m-1\rangle \tag{7.80}$$

と書ける[1)]．この両辺のノルムをとると，

$$\langle j, m|\hat{j}^+\hat{j}^-|j, m\rangle = c_m{}^2 \tag{7.81}$$

となるが，(7.76)を使うと左辺は，

$$\begin{aligned}&\langle j, m|\hat{j}^+\hat{j}^-|j, m\rangle\\ &=\langle j, m|(\hat{\boldsymbol{j}}^2-\hat{j}^3(\hat{j}^3-1))|j, m\rangle\\ &=j(j+1)-m(m-1)\end{aligned} \tag{7.82}$$

と変形できるから，けっきょく，

$$c_m = \sqrt{j(j+1)-m(m-1)} \tag{7.83}$$

---

1)　$|j, m\rangle$ の位相を，

$\hat{j}^-|j, m\rangle = (\text{正の数}) \times |j, m-1\rangle$

となるように選ぶことが多い．本書でもこれに従う．

が得られる．

$\hat{j}^+$ の $|j, m\rangle$ に対する作用を調べるためには，(7.80)を

$$|j, m\rangle = \frac{1}{c_{m+1}}\hat{j}^-|j, m+1\rangle \tag{7.84}$$

と書きかえて，両辺に $\hat{j}^+$ を作用させればよい．そうすると，

$$\hat{j}^+|j, m\rangle = \frac{1}{c_{m+1}}\hat{j}^+\hat{j}^-|j, m+1\rangle \tag{7.85}$$

となるが，(7.76)を使うと，

$$\begin{aligned}(\text{上式}) &= \frac{1}{c_{m+1}}\{\hat{\boldsymbol{j}}^2 - \hat{j}^3(\hat{j}^3 - 1)\}|j, m+1\rangle \\ &= \frac{1}{c_{m+1}}\{j(j+1) - m(m+1)\}|j, m+1\rangle \end{aligned} \tag{7.86}$$

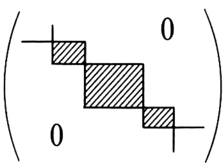
と変形できるから，(7.83)を使うと，

$$\hat{j}^+|j, m\rangle = \sqrt{j(j+1) - m(m+1)}\,|j, m+1\rangle \tag{7.87}$$

が得られる．係数を無視して大まかにいうと，$\hat{j}^-$ は $|j, m\rangle$ を $|j, m-1\rangle$ に写し，$\hat{j}^+$ はその逆であるといえる．

以上のようにして，$|j, m\rangle$ $(m=j, j-1, \cdots, -j)$ ではられる $2j+1$ 次元の部分空間は，$\hat{\boldsymbol{j}}$ の作用に関して閉じていることがわかった．すなわち，この部分空間に属する任意の状態ベクトルに，$\hat{\boldsymbol{j}}$ のどの成分を作用させてもこの部分空間のなかにおさまっている．ところが，$\hat{\boldsymbol{j}}$ はエルミートであるから，この部分空間の直交補空間も $\hat{\boldsymbol{j}}$ の作用に関して閉じている．これは，いままでの議論をその直交補空間に対して繰り返すことができることを意味している．そのような操作を繰り返すと，もとの状態空間 V を，上のような構造をもつ $\hat{\boldsymbol{j}}$ に関して閉じた部分空間の直和に分解することができる．

すなわち，V の基底を適当にとると，$\hat{j}^1, \hat{j}^2, \hat{j}^3$ は同時にブロック対角の形，



(7.88)

となる．ここで，各ブロックの構造はその次元だけで定まっている．次元が $2j+1$ のブロックは，適当に基底 $|j, m\rangle$ $(m=j, j-1, \cdots, -j)$ をとると，

$$\hat{j}^3|j, m\rangle = m|j, m\rangle \tag{7.89 a}$$

$$\hat{j}^+|j, m\rangle = \sqrt{j(j+1) - m(m+1)}\,|j, m+1\rangle \tag{7.89 b}$$

$$\hat{j}^-|j, m\rangle = \sqrt{j(j+1)-m(m-1)}\,|j, m-1\rangle \tag{7.89 c}$$

の形になっている．とくに，各ブロック上で $\hat{\boldsymbol{j}}^2$ は $j(j+1)$ に等しいスカラー行列である．すなわち，

$$\hat{\boldsymbol{j}}^2|j, m\rangle = j(j+1)|j, m\rangle \tag{7.90}$$

以下，状態 $|j, m\rangle$ がもつ角運動量の大きさとは，j のことをさすとしよう．

最後に，ここで考えたような $2j+1$ 次元のブロックがさらに2つ以上のブロックに分解することはないことに注意しよう．すなわち，この $2j+1$ 次元空間の部分空間で $\hat{\boldsymbol{j}}$ に関して閉じているものは，自分じしんとゼロ空間だけである．この意味で，ここで考えているような $2j+1$ 次元空間は，$\hat{\boldsymbol{j}}$ に関して既約であるといったり，(7.89)は $\hat{\boldsymbol{j}}$ の既約表現であるといったりする．

例題　(7.89)で与えられている表現が既約であることを示せ．

解　$|j, m\rangle$ $(m=j, j-1, \cdots, -j)$ ではられる $2j+1$ 次元空間の部分空間 W が，$\hat{\boldsymbol{j}}$ に関して閉じていたとする．W はゼロ空間でないとして，W のゼロベクトルでない1つの元を $|\psi\rangle$ としよう．$|\psi\rangle$ を $|j, m\rangle$ で展開して，

$$|\psi\rangle = \sum_{m=-j}^{j} a_m |j, m\rangle$$

としよう．$a_{-j}, a_{-j+1}, a_{-j+2}, \cdots, a_j$ のうち0でない最初のものを a_{-j+q} とすると，

$$|\psi\rangle = \sum_{m=-j+q}^{j} a_m |j, m\rangle$$

と書ける．ここで，$(\hat{j}^+)^{2j-q}|\psi\rangle$ を考えると，これは $|j, j\rangle$ に比例しており，ゼロベクトルではない．ところで，W は $\hat{\boldsymbol{j}}$ に関して閉じているとしたから，$|\psi\rangle$ が W の元ならば $(\hat{j}^+)^{2j-q}|\psi\rangle$ も W の元であるはずである．すなわち，$|j, j\rangle$ が W の元であることが示された．任意の m に対して，$|j, m\rangle$ は $|j, j\rangle$ に $\hat{j}^-$ を何回か作用させることにより得られるから，$|j, j\rangle$ が W の元ならば $|j, m\rangle$ も W の元である．すなわち，W はもとの $2j+1$ 次元空間と一致する．これは，(7.89)で与えられる表現が既約であるということである．■

［問題3］　系の状態が $\hat{\boldsymbol{r}}$ と $\hat{\boldsymbol{p}}$ で完全に記述されているような1粒子系に対して，角運動量の固有状態を求めよう．この場合の角運動量を

$$\boldsymbol{L} = \hat{\boldsymbol{r}} \times \hat{\boldsymbol{p}} = \hbar \hat{\boldsymbol{l}}$$

とおこう．

(1) 極座標で，

$$\hat{l}^+ = \hat{l}^1 + i\hat{l}^2 = e^{i\varphi}\left(\frac{\partial}{\partial\theta} + i\cot\theta\frac{\partial}{\partial\varphi}\right)$$

$$\hat{l}^{-}=\hat{l}^{1}-i\hat{l}^{2}=e^{-i\varphi}\left(-\frac{\partial}{\partial\theta}+i\cot\theta\frac{\partial}{\partial\varphi}\right) \qquad ①$$

$$\hat{l}^{3}=-i\frac{\partial}{\partial\varphi}$$

と書けることを示せ．

(2) $\hat{l}^{3}Y_l^l(\theta,\varphi)=lY_l^l(\theta,\varphi)$

$$\hat{l}^{+}Y_l^l(\theta,\varphi)=0 \qquad ②$$

をみたす $Y_l^l(\theta,\varphi)$ を求めよ．

(3) $$Y_l^{m-1}(\theta,\varphi)=\frac{1}{\sqrt{l(l+1)-m(m-1)}}\hat{l}^{-}Y_l^m(\theta,\varphi) \qquad ③$$

$$(m=l,\ l-1,\ l-2,\cdots)$$

で定まる $Y_l^m(\theta,\varphi)$ を求めよ．

(4) 軌道角運動量とパリティの関係を調べよ．

［解］ (1) $x=r\sin\theta\cos\varphi$

$y=r\sin\theta\sin\varphi$

$z=r\cos\theta$

より，

$$\frac{\partial}{\partial x}=\sin\theta\cos\varphi\frac{\partial}{\partial r}+\frac{\cos\theta\cos\varphi}{r}\frac{\partial}{\partial\theta}-\frac{\sin\varphi}{r\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi}$$

$$\frac{\partial}{\partial y}=\sin\theta\sin\varphi\frac{\partial}{\partial r}+\frac{\cos\theta\sin\varphi}{r}\frac{\partial}{\partial\theta}+\frac{\cos\varphi}{r\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi}$$

$$\frac{\partial}{\partial z}=\cos\theta\frac{\partial}{\partial r}-\frac{\sin\theta}{r}\frac{\partial}{\partial\theta}$$

を得る．これらを $\hat{\boldsymbol{l}}$ の定義式 $\hat{\boldsymbol{l}}=-i\boldsymbol{r}\times\dfrac{\partial}{\partial\boldsymbol{r}}$ に代入して少し計算すると①が得られる．ここで，①は動径 r を含んでいないことに注意しよう．これは $\hat{\boldsymbol{l}}$ が回転の生成子であり，r を変化させないことからも明らかであろう．

(2) $\hat{l}^{3}Y_l^l=-i\dfrac{\partial}{\partial\varphi}Y_l^l=lY_l^l$

より，$\Theta_l^l(\theta)$ を θ の関数として，

$$Y_l^l(\theta,\varphi)=e^{il\varphi}\Theta_l^l(\theta)$$

と書けることがわかる．これを，

$$\hat{l}^{+}Y_l^l=e^{i\varphi}\left(\frac{\partial}{\partial\theta}+i\cot\theta\frac{\partial}{\partial\varphi}\right)Y_l^l=0$$

に代入すると，

$$\left(\frac{\partial}{\partial\theta}-l\cot\theta\right)\Theta_l{}^l(\theta)=0$$

が得られる．これを解くと，N_l を積分定数として，

$$\Theta_l{}^l(\theta)=N_l(\sin\theta)^l$$

となるが，N_l を $Y_l{}^l(\theta,\varphi)$ が球面上で１に規格化されているように選ぼう．すなわち，

$$\int d\Omega\,|\,Y_l{}^l(\theta,\varphi)|^2=\int_0^\pi d\theta\int_0^{2\pi}d\varphi\sin\theta\,|\,Y_l{}^l(\theta,\varphi)|^2=1$$

としよう．簡単な計算ののち，$N_l=\dfrac{(-1)^l}{2^l l!}\sqrt{\dfrac{(2l+1)!}{4\pi}}$ とすればよいことがわかる．

(3) ③を繰り返し使うと，

$$Y_l^m(\theta,\varphi)=\sqrt{\frac{(l+m)!}{(2l)!(l-m)!}}(\hat{l}^-)^{l-m}Y_l^l(\theta,\varphi)$$

が得られる．これは，任意の θ の関数 $f(\theta)$ に対して

$$\hat{l}^-(e^{im\varphi}f(\theta))=-e^{i(m-1)\varphi}\frac{1}{(\sin\theta)^m}\frac{\partial}{\partial\theta}((\sin\theta)^m f(\theta))$$

と書けることに注意すると簡単に計算できる．そのように計算すると，けっきょく，

$$Y_l^m(\theta,\varphi)=e^{im\varphi}\Theta_l^m(\theta)$$

$$\Theta_l^m(\theta)=(-1)^m\frac{1}{2^l l!}\sqrt{\frac{(2l+1)(l+m)!}{4\pi(l-m)!}}\frac{1}{(\sin\theta)^m}\left(\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\right)^{l-m}(\sin\theta)^{2l} \qquad ⓐ$$

となる．ここでは，$m=l$ のもの Y_l^l に下降演算子を作用させて Y_l^m を与える式を導いたが，逆に $m=-l$ のもの Y_l^{-l} に上昇演算子を作用させると，同じものを別の形で表すことができる．実際，ⓐにおいて $m=-l$ とおいて少し計算すると，

$$Y_l^{-l}(\theta,\varphi)=\frac{1}{2^l l!}\sqrt{\frac{(2l+1)!}{4\pi}}e^{-il\varphi}(\sin\theta)^l$$

が得られるが，他の Y_l^m は(7.89b)から，

$$Y_l^m(\theta,\varphi)=\sqrt{\frac{(l-m)!}{(2l)!(l+m)!}}(l^+)^{l+m}Y_l^{-l}(\theta,\varphi)$$

と書けるはずである．これは，任意の θ の関数 $f(\theta)$ に対して，

$$\hat{l}^+(e^{im\varphi}f(\theta))=e^{i(m+1)\varphi}(\sin\theta)^m\frac{\partial}{\partial\theta}((\sin\theta)^{-m}f(\theta))$$

となることに注意すると計算できて，つぎの形にまとまる．

$$Y_l^m(\theta,\varphi)=e^{im\varphi}\Theta_l^m(\theta),$$

$$\Theta_l^m(\theta)=\frac{1}{2^l l!}\sqrt{\frac{(2l+1)(l-m)!}{4\pi(l+m)!}}(\sin\theta)^m\left(\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\right)^{l+m}(\sin\theta)^{2l} \qquad ⓑ$$

5.3節の結果が，$m\geqq 0$ のときはⓑの形と一致し，$m\leqq 0$ のときはⓐの形に一致していることは明らかであろう．

(4) パリティ演算子 $\mathscr{P}$ は角運動量の演算子と可換であるから，$Y_l^m(\theta,\varphi)$ のパリティはmに依存しない．ところで，$Y_l^l(\theta,\varphi)$ は $e^{il\varphi}(\sin\theta)^l$ に比例するから，パリティ変換 $\varphi\mapsto\varphi+\pi$，$\theta\mapsto\pi-\theta$ を施すと，$(-1)^l$ 倍される．よって軌道角運動量 l の状態は，パリティ $(-1)^l$ をもつことがわかった． ▮

7.5 軌道角運動量とスピン角運動量

前節の議論からわかったように，角運動量の大きさ，すなわち $\hat{J}^2$ の固有値を $\hbar^2 j(j+1)$ と書いたときの j は，一般には整数か半整数の値をとりうる．しかしながら，いくつかの粒子からなる系がそれらの位置と運動量によって完全に記述されているときには，j は整数値しかとらないことに注意しよう．実際，そのような場合には系の状態は1価な波動関数 $\psi(\boldsymbol{r}_1,\cdots,\boldsymbol{r}_N)=\langle\boldsymbol{r}_1,\cdots,\boldsymbol{r}_N|\psi\rangle$ によって記述されているから，z 軸のまわりに 2π だけ回転させると，波動関数はもとの値にもどる．これは，そのような操作を表す演算子 $\exp\left(\frac{2\pi}{i\hbar}\hat{J}^3\right)$ が1に等しいということであり，$\hat{J}^3$ の固有値がすべて $\hbar$ の整数倍であること，すなわち，j が整数であることを意味している．

実は，あとで述べるように，電子や陽子などのいろいろな粒子は座標と運動量以外に，スピンとよばれる自由度をもっており，全角運動量は(7.57 b)のような軌道部分にスピンからくる寄与を加えたものであることが知られている．全角運動量に対する寄与のうち，軌道部分からくるものを軌道角運動量とよび，スピンからくるものをスピン角運動量とよんでいる．上でみたように，軌道角運動量の大きさは，常に整数値であるが，以下で議論するようにスピン角運動量は半整数値もとりうる．

スピン角運動量

いくつかの粒子からなる複合粒子の基底状態がゼロでない固有角運動量(すなわち重心のまわりの角運動量) l をもっているとする．このとき，基底状態はもちろん $(2l+1)$ 重に縮退している．この複合粒子が，そのひろがりに比べて比較的ゆっくり変化する外場のなかにおかれているとしよう．すなわち，複合粒子は全体としては運動するが，内部的には励起されることはなく，基底状態にとどまっているような状況を考えよう．そうすると，複合粒子のとりうる状態を指定するための波動関数

としては，位置 $\boldsymbol{r}$ および固有角運動量の z 成分 m の関数 $\psi(\boldsymbol{r}, m)$ のようなものを考えてやればよい．すなわち，m の $2l+1$ 個の値に対応した，$2l+1$ 個の $\boldsymbol{r}$ の関数の組によって複合粒子の状態が指定されることになる．

このように考えると，現在われわれが素な粒子と考えているものが，固有の角運動量をもっていても，少しもおかしくはないであろう．実際に，電子や核子(あるいはそれを構成するクォーク)は固有の角運動量をもっている．固有の角運動量を軌道角運動量と区別するために，スピンあるいはスピン角運動量とよぶ．その演算子を $\hat{\boldsymbol{S}}=\hbar\hat{\boldsymbol{s}}$ と書くと，$\hat{\boldsymbol{S}}$ は重心運動と独立であり，$\hat{\boldsymbol{S}}$ どうしは角運動量の交換関係をみたしているはずである．また，$\hat{\boldsymbol{s}}$の大きさは上の議論のlに対応するものであり，粒子ごとにきまった値であると考えるのが自然である．その値をsと書き，スピンの大きさとよぶ．すなわち，スピンがsである粒子を記述する演算子は座標 $\hat{\boldsymbol{r}}$，運動量 $\hat{\boldsymbol{p}}$ およびスピン $\hat{\boldsymbol{s}}$ であり，それらは通常の正準交換関係

$$\begin{aligned}[]
[\hat{r}^a, \hat{p}^b] &= i\hbar\delta^{ab} \\
[\hat{r}^a, \hat{r}^b] &= [\hat{p}^a, \hat{p}^b]=0
\end{aligned} \tag{7.91}$$

のほかに，

$$\begin{aligned}[]
[\hat{r}^a, \hat{s}^b] &= [\hat{p}^a, \hat{s}^b]=0 \\
[\hat{s}^a, \hat{s}^b] &= i\sum_{c=1}^{3}\varepsilon^{abc}\hat{s}^c \\
\hat{\boldsymbol{s}}^2 &= s(s+1)
\end{aligned} \tag{7.92}$$

をみたしている．

演算子 $\hat{\boldsymbol{s}}$ は $\hat{\boldsymbol{r}}$ とも $\hat{\boldsymbol{p}}$ とも交換するから，状態空間の完全系としては，$|\boldsymbol{r}, s_z\rangle$ の形のものがとれる．そうすると，$\hat{\boldsymbol{r}}$ と $\hat{\boldsymbol{p}}$ はケット記号のなかの第１の変数 $\boldsymbol{r}$ のみに働き，$\hat{\boldsymbol{s}}$ は第２の変数のみに働くとしてよい．ここで，s_z は $\hat{\boldsymbol{s}}$ の z 成分の固有値であり，$\hat{\boldsymbol{s}}$ の作用は一般の場合(7.89)で j を s とし m を s_z としたもので与えられる．これは数学的にいうと，スピンがある場合の状態空間は，スピンがない場合の状態空間と，大きさ s の角運動量に対応する $2s+1$ 次元空間のテンソル積であるということである．

スピンは粒子の重心のまわりの固有角運動量に対応しているので，粒子の全角運動量 $\hat{\boldsymbol{J}}$ は，軌道角運動量とスピン角運動量の和で与えられる．すなわち，$\hat{\boldsymbol{L}}=\hat{\boldsymbol{r}}\times\hat{\boldsymbol{p}}$ として，

$$\hat{\boldsymbol{J}}=\hat{\boldsymbol{L}}+\hat{\boldsymbol{S}} \tag{7.93}$$

と書ける．$\hat{\boldsymbol{J}}$ が実際に角運動量の交換関係をみたすこと，すなわち，

$$[\hat{J}^a, \hat{J}^b]=i\hbar\sum_{c=1}^{3}\varepsilon^{abc}\hat{J}^c \tag{7.94}$$

は容易に確かめることができる.

例題 1 (7.94)を示せ.

解 (7.92)より，明らかに $\hat{\boldsymbol{L}}$ と $\hat{\boldsymbol{S}}$ は可換である．よって,

$$[\hat{J}^a, \hat{J}^b] = [\hat{L}^a + \hat{S}^a, \hat{L}^b + \hat{S}^b] = [\hat{L}^a, \hat{L}^b] + [\hat{S}^a, \hat{S}^b]$$

が成り立つ．ところが，$\hat{\boldsymbol{L}}$ どうしおよび $\hat{\boldsymbol{S}}$ どうしは角運動量の交換関係をみたす．ゆえに,

$$(\text{上式}) = i\hbar\sum_{c=1}^{3}\varepsilon^{abc}\hat{L}^c + i\hbar\sum_{c=1}^{3}\varepsilon^{abc}\hat{S}^c = i\hbar\sum_{c=1}^{3}\varepsilon^{abc}(\hat{L}^c + \hat{S}^c) = i\hbar\sum_{c=1}^{3}\varepsilon^{abc}\hat{J}^c$$

となる． ▮

スピンの大きさ s がとくに大きな数でなければ，全角運動量 $\hat{\boldsymbol{J}}$ に対するスピンの寄与は Planck 定数 $\hbar$ のオーダーであり，古典極限では無視されてしまうことに注意しよう．この意味で，スピンは純粋に量子力学的な自由度であり，古典論に対応物をもたない．前に述べたように，波動関数が1価であることから，軌道角運動量が整数値でなければならないことが導かれるが，スピン角運動量にはそのような制限はつかない．実際，電子や核子などはスピン $\frac{1}{2}$ をもつことが知られている．

スピン $\frac{1}{2}$ の場合

スピンが $\frac{1}{2}$ である場合をくわしく調べておこう．この場合のスピンの自由度は2次元のベクトル空間で表される．その2次元空間に働くスピン演算子 $\hat{\boldsymbol{s}}$ の具体的な表示は，(7.89)で $j=\frac{1}{2}$ の場合を考えれば容易に求められる．その結果,

$$\hat{\boldsymbol{s}} = \frac{1}{2}\boldsymbol{\sigma} \tag{7.95 a}$$

$$\sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \tag{7.95 b}$$

と書けることがわかる．ここで，$\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3$ は Pauli 行列とよばれる.

例題 2 (1) (7.89)の $j=\frac{1}{2}$ の場合を調べ，(7.95)を示せ.

(2) Pauli 行列がつぎの性質をみたすことを示せ.

$$\sigma_1{}^2=\sigma_2{}^2=\sigma_3{}^2=1$$
$$\sigma_1\sigma_2=-\sigma_2\sigma_1=i\sigma_3$$
$$\sigma_2\sigma_3=-\sigma_3\sigma_2=i\sigma_1$$
$$\sigma_3\sigma_1=-\sigma_1\sigma_3=i\sigma_2$$

(3) 上の式から $\hat{\boldsymbol{s}}=\frac{1}{2}\boldsymbol{\sigma}$ が角運動量の交換関係

$$[\hat{s}^a, \hat{s}^b]=i\varepsilon^{abc}\hat{s}^c$$

をみたすことを確かめよ．

解　(1) (7.89) において $\hat{j}^a$ を $\hat{s}^a$ でおきかえたものの $j=\frac{1}{2}$ の場合を考える．簡単のため $|\frac{1}{2}, \pm\frac{1}{2}\rangle$ を $|\pm\frac{1}{2}\rangle$ と書こう．そうすると，

$$\hat{s}^3|\tfrac{1}{2}\rangle=\tfrac{1}{2}|\tfrac{1}{2}\rangle,\quad \hat{s}^3|-\tfrac{1}{2}\rangle=-\tfrac{1}{2}|-\tfrac{1}{2}\rangle$$
$$\hat{s}^+|\tfrac{1}{2}\rangle=0,\quad \hat{s}^+|-\tfrac{1}{2}\rangle=|\tfrac{1}{2}\rangle$$
$$\hat{s}^-|\tfrac{1}{2}\rangle=|-\tfrac{1}{2}\rangle,\quad \hat{s}^-|-\tfrac{1}{2}\rangle=0$$

が得られる．

$$\hat{s}^1=\frac{1}{2}(\hat{s}^++\hat{s}^-),\quad \hat{s}^2=\frac{1}{2i}(\hat{s}^+-\hat{s}^-)$$

に注意して行列で表示すると (7.95) が得られる．

ただし，$|\frac{1}{2}\rangle\leftrightarrow\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}$，$|-\frac{1}{2}\rangle\leftrightarrow\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}$ としている．

(2) (7.95 b) より，具体的に計算すれば明らかである．このような関係式は計算上便利なものであるが，スピン $\frac{1}{2}$ の場合の特殊性であって，一般のスピンの場合に成り立つものではないことに注意しよう．

(3) $[\hat{s}^1, \hat{s}^2]=\frac{1}{4}[\sigma_1, \sigma_2]=\frac{1}{4}(\sigma_1\sigma_2-\sigma_2\sigma_1)=\frac{1}{2}\sigma_1\sigma_2=\frac{i}{2}\sigma_3$

$\quad=i\hat{s}^3$

他も同様である．　▮

スピン $\frac{1}{2}$ をもつ 1 つの粒子を考えると，その状態空間の完全系として $|\boldsymbol{r}, s_z\rangle$ $\left(s_z=\pm\frac{1}{2}\right)$ をとることができる．自由な場合のハミルトニアンはスピンがない場合と

同じ形

$$\hat{H}=\frac{1}{2m}\hat{\boldsymbol{p}}^2 \tag{7.96}$$

であるとし，2 成分の波動関数を，

$$\boldsymbol{\psi}(\boldsymbol{r})=\begin{pmatrix}\psi_1(\boldsymbol{r})\\ \psi_2(\boldsymbol{r})\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\langle \boldsymbol{r},+\frac{1}{2}|\psi\rangle\\ \langle \boldsymbol{r},-\frac{1}{2}|\psi\rangle\end{pmatrix} \tag{7.97}$$

で定義すると，Schrödinger 方程式が，

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\boldsymbol{\psi}(\boldsymbol{r})=-\frac{\hbar^2}{2m}\varDelta\boldsymbol{\psi}(\boldsymbol{r}) \tag{7.98}$$

の形に書けることは明らかであろう．ただし，この場合 $\boldsymbol{\psi}(\boldsymbol{r})$ は 2 成分の量であり，(7.98) は 2 つの成分をもつ場に対する波動方程式である．これは，Maxwell 方程式を 4 元ポテンシャルで表したときに，ベクトル場に対する波動方程式になるのと似ている．ここで考えている $\boldsymbol{\psi}(\boldsymbol{r})$ のように，スピン $\frac{1}{2}$ に関係して現れる 2 成分の場をスピノル場とよぶ．

スピノル場の変換性

スピン $\frac{1}{2}$ の粒子が 2 成分スピノル場の波動関数 $\boldsymbol{\psi}(\boldsymbol{r})$ で表される状態にあったとしよう．この系に対して回転のベクトルが $\boldsymbol{\theta}$ であるような回転を施したときの波動関数を $\boldsymbol{\psi}'(\boldsymbol{r})$ とする．$\boldsymbol{\psi}'(\boldsymbol{r})$ が $\boldsymbol{\psi}(\boldsymbol{r})$ を使ってどのように表されるかを考えてみよう．7.3 節でみたように，系を回転させるということは，状態ベクトルに演算子

$$\hat{U}(\boldsymbol{\theta})=\exp\left(\frac{1}{i\hbar}\boldsymbol{\theta}\cdot\hat{\boldsymbol{J}}\right) \tag{7.99}$$

を作用させることである．ここで，$\hat{\boldsymbol{J}}$ は全角運動量であり，軌道角運動量 $\hat{\boldsymbol{L}}$ とスピン角運動量 $\hat{\boldsymbol{S}}$ の和である．すなわち，回転後の状態を表す 2 成分波動関数 $\boldsymbol{\psi}'(\boldsymbol{r})$ は，

$$\boldsymbol{\psi}'(\boldsymbol{r})=\begin{pmatrix}\psi_1'(\boldsymbol{r})\\ \psi_2'(\boldsymbol{r})\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\langle \boldsymbol{r},+\frac{1}{2}|\hat{U}(\boldsymbol{\theta})|\psi\rangle\\ \langle \boldsymbol{r},-\frac{1}{2}|\hat{U}(\boldsymbol{\theta})|\psi\rangle\end{pmatrix} \tag{7.100}$$

で与えられる．

ところで，$\hat{\boldsymbol{L}}$ と $\hat{\boldsymbol{S}}$ は可換であるから，$\hat{U}(\boldsymbol{\theta})$ を，

$$\hat{U}(\boldsymbol{\theta})=\exp\left(\frac{1}{i\hbar}\boldsymbol{\theta}\cdot\hat{\boldsymbol{L}}\right)\exp\left(\frac{1}{i\hbar}\boldsymbol{\theta}\cdot\hat{\boldsymbol{S}}\right) \tag{7.101}$$

のように 2 つの因子に分けて，第 1 因子は座標変数に作用し，第 2 因子はスピンの

変数に作用すると考えてよい．そうすると，

$$\langle \boldsymbol{r}, s_z | \hat{U}(\boldsymbol{\theta}) | \psi \rangle = \sum_{s_z'} \int d^3\boldsymbol{r}' \langle \boldsymbol{r}, s_z | \hat{U}(\boldsymbol{\theta}) | \boldsymbol{r}', s_z' \rangle \langle \boldsymbol{r}', s_z' | \psi \rangle$$

$$= \sum_{s_z'} \int d^3\boldsymbol{r}' \langle \boldsymbol{r} | \exp\left(\frac{1}{i\hbar}\boldsymbol{\theta}\cdot\hat{\boldsymbol{L}}\right) | \boldsymbol{r}' \rangle \langle s_z | \exp\left(\frac{1}{i\hbar}\boldsymbol{\theta}\cdot\hat{\boldsymbol{S}}\right) | s_z' \rangle \langle \boldsymbol{r}', s_z' | \psi \rangle \qquad (7.102)$$

が得られる．ここで，3 次元ベクトルを回転させる行列 $R(\boldsymbol{\theta})$ を使って，

$$\exp\left(\frac{1}{i\hbar}\boldsymbol{\theta}\cdot\hat{\boldsymbol{L}}\right) | \boldsymbol{r}' \rangle = | R(\boldsymbol{\theta})\boldsymbol{r}' \rangle \qquad (7.103)$$

と書き，(7.95) で与えられた $\hat{\boldsymbol{s}}$ の表式を使うと，けっきょく，

$$\boldsymbol{\psi}'(\boldsymbol{r}) = \exp\left(-\frac{i}{2}\boldsymbol{\theta}\cdot\boldsymbol{\sigma}\right)\boldsymbol{\psi}(R^{-1}(\boldsymbol{\theta})\boldsymbol{r}) \qquad (7.104)$$

が得られる．

この式は，ベクトル場のときと比べると意味が明確になるであろう．たとえば，ベクトル・ポテンシャル $\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r})$ で表されるような磁場を原点のまわりに $\boldsymbol{\theta}$ だけ回転したものは，明らかにベクトル・ポテンシャル

$$\boldsymbol{A}'(\boldsymbol{r}) = R(\boldsymbol{\theta})\boldsymbol{A}(R^{-1}(\boldsymbol{\theta})\boldsymbol{r}) \qquad (7.105)$$

をもつ．すなわち，空間の各点で 3 成分の量が定義されており，回転に際してそれらは 3 次元ベクトルのように変換する．同様の見方を (7.104) にあてはめてみると，スピノル場 $\boldsymbol{\psi}(\boldsymbol{r})$ とは，空間の各点で 2 成分の量が定義されており，回転に際して $\exp\left(-\frac{i}{2}\boldsymbol{\theta}\cdot\boldsymbol{\sigma}\right)$ という行列によって変換するようなものであるといえる．

ここでは，座標系は変えずに系を回転するという見方で (7.104) や (7.105) を考えたが，系を動かさずに座標系をとりかえたと考えてもよい．すなわち，これらの式は，$\boldsymbol{r}' = R(\boldsymbol{\theta})\boldsymbol{r}$ と表される座標変換に対して，場の量がどのように変化するかを示しているものとみなすこともできる．

[問題 4]　スピンの大きさが s であるような粒子が，一様磁場中におかれているとする．軌道運動は無視してスピンの時間変化だけを考えると，ハミルトニアンは，

$$\hat{H} = k\hat{\boldsymbol{s}}\cdot\boldsymbol{B}$$

と書ける．ここで，$\hat{\boldsymbol{s}}$ はスピン演算子，$\boldsymbol{B}$ は一様な外部磁場であり，定数 k は考えている粒子に固有の定数である．以下では $\boldsymbol{B}$ は z 軸の正の向きを向いているとする．

(1) スピンに対する Schrödinger 方程式を解け．

(2) スピンの各成分の期待値の時間発展を調べよ．

(3) 上の結果を軸対称こまの歳差運動と比べよ．

[解] (1) $\hat{s}_z$ を対角化する基底を $|s, m\rangle (m=s, s-1, \cdots, -s)$ とする．すなわち，

$$\hat{s}_z |s, m\rangle = m|s, m\rangle$$

状態ベクトル $|\psi(t)\rangle$ を，

$$|\psi(t)\rangle = \sum_m c_m(t)|s, m\rangle$$

と展開すると，Schrödinger 方程式

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\psi(t)\rangle = kB\hat{s}_z|\psi(t)\rangle$$

の解は，

$$|\psi(t)\rangle = \sum_m c_m(0)\exp\left(\frac{kBm}{i\hbar}t\right)|s, m\rangle \quad ⓐ$$

と書ける．

(2) (7.89) をいまの場合に使うと，

$$\langle s, m'|\hat{s}_z|s, m\rangle = m\delta_{m',m}$$

$$\langle s, m'|(\hat{s}_x + i\hat{s}_y)|s, m\rangle = \sqrt{s(s+1)-m(m+1)}\,\delta_{m',m+1}$$

が得られる．これらの式を使うと，ⓐより

$$\langle\psi(t)|\hat{s}_z|\psi(t)\rangle = \sum_m m|c_m(0)|^2$$

$$\langle\psi(t)|(\hat{s}_x + i\hat{s}_y)|\psi(t)\rangle = \{\sum_m\sqrt{s(s+1)-m(m+1)}\,c_{m+1}(0)^* c_m(0)\}\exp\left(i\frac{kB}{\hbar}t\right)$$

となる．第1の式は，スピンの z 成分が時間によらないことを示しており，第2の式は，スピンを x-y 面に投影したものは角速度 $\dfrac{kB}{\hbar}$ で回転することを示している．

(3) スピン s の粒子を，直観的に，大きさが $M=\hbar s$ の角運動量 $\boldsymbol{M}$ をもつこまのように考えてみよう．ハミルトニアンは，

$$\hat{H} = kB\hat{s}_z = kBs\left(\frac{\hat{s}_z}{s}\right)$$

と書けるが，$\dfrac{\hat{s}_z}{s}$ をこまの軸と z 軸のなす角の余弦とみなすことにしよう．これは，こまの軸が z 軸の負の向きのときに最小のエネルギーをもつことを意味しており，

$$\boldsymbol{\tau} = kBs\boldsymbol{n}_z \times \frac{\boldsymbol{M}}{M} = \frac{kB}{\hbar}\boldsymbol{n}_z \times \boldsymbol{M}$$

で与えられるトルクが働いていることを示している．ここで $\boldsymbol{n}_z$ は z 軸の正の向きの単位ベクトルである．このようなこまの運動は，

$$\frac{d\boldsymbol{M}}{dt}=\boldsymbol{\tau}=\frac{kB}{\hbar}\boldsymbol{n}_z\times\boldsymbol{M}$$

で与えられるが，これは，たしかに(2)の結果と同様の運動を示す．このように，スピンの性質には，剛体の自転と似たところがあるが，このアナロジーをあまり真に受けてはいけない．　∎

7.6　角運動量の合成

2 つの独立な系 S_1 と S_2 をあわせた系 S を考える．S_1 および S_2 の角運動量の演算子を，それぞれ $\hbar\hat{\boldsymbol{j}}_1$ および $\hbar\hat{\boldsymbol{j}}_2$ とすると，$\hat{\boldsymbol{j}}_1$，$\hat{\boldsymbol{j}}_2$ はそれぞれ角運動量の交換関係をみたすが，2 つの系がたがいに独立ならば，$\hat{\boldsymbol{j}}_1$ と $\hat{\boldsymbol{j}}_2$ は可換なはずである．よって，

$$[\hat{j}_1{}^a, \hat{j}_1{}^b]=i\sum_{c=1}^{3}\varepsilon^{abc}\hat{j}_1{}^c, \tag{7.106 a}$$

$$[\hat{j}_2{}^a, \hat{j}_2{}^b]=i\sum_{c=1}^{3}\varepsilon^{abc}\hat{j}_2{}^c, \tag{7.106 b}$$

$$[\hat{j}_1{}^a, \hat{j}_2{}^b]=0 \tag{7.106 c}$$

このとき，合成系 S の角運動量の演算子を $\hbar\hat{\boldsymbol{j}}$ とすると，

$$\hat{\boldsymbol{j}}=\hat{\boldsymbol{j}}_1+\hat{\boldsymbol{j}}_2 \tag{7.107}$$

と書けるであろう．

もう少し数学的に厳格にいうと，合成系 S を考えるということは，S_1 の状態空間 V_1 と S_2 の状態空間 V_2 のテンソル積 $V_1\otimes V_2$ を考えるということであり，$\hat{\boldsymbol{j}}$ はその上に働く演算子として，

$$\hat{\boldsymbol{j}}=\hat{\boldsymbol{j}}_1\otimes 1+1\otimes\hat{\boldsymbol{j}}_2 \tag{7.107$'$}$$

で定義される．しかし，通常は $\hat{\boldsymbol{j}}_1\otimes 1$ や $1\otimes\hat{\boldsymbol{j}}_2$ をそれぞれ $\hat{\boldsymbol{j}}_1$，$\hat{\boldsymbol{j}}_2$ と同一視して(7.107)のように書くのである．また，$V_1\otimes V_2$ の元 $|v_1\rangle\otimes|v_2\rangle$ も単に $|v_1\rangle|v_2\rangle$ のように書くのが普通である．

ここでは，具体的なイメージを与えるために，$\hat{\boldsymbol{j}}_1$ と $\hat{\boldsymbol{j}}_2$ は独立な系の角運動量の演算子としたが，これからの議論で必要なのは，$\hat{\boldsymbol{j}}_1$ と $\hat{\boldsymbol{j}}_2$ が独立な空間に作用しており，それぞれ角運動量の交換関係をみたしていることである．よって，$\hat{\boldsymbol{j}}_1$ として粒子の軌道角運動量，$\hat{\boldsymbol{j}}_2$ としてスピン角運動量，$\hat{\boldsymbol{j}}$ として全角運動量をとってもよいし，あるいはまた，$\hat{\boldsymbol{j}}_1$，$\hat{\boldsymbol{j}}_2$ を 2 つの粒子のスピンとし，$\hat{\boldsymbol{j}}$ を全スピンとみなしてもよい．

ここで，系 S_1 は，$\hat{\boldsymbol{j}}_1$ の大きさが j_1 であるような $(2j_1+1)$ 個の状態 $|j_1, m_1\rangle$ $(m_1=j_1, j_1-1, \cdots, -j_1)$ をとるとし，系 S_2 は，$\hat{\boldsymbol{j}}_2$ の大きさが j_2 であるような $(2j_2+1)$

個の状態 $|j_2, m_2\rangle$ $(m_2=j_2, j_2-1, \cdots, -j_2)$ をとるとしよう．そうすると，合成系 S は $(2j_1+1)(2j_2+1)$ 個の状態

$$|j_1, m_1\rangle|j_2, m_2\rangle \qquad (m_1=j_1, \cdots, -j_1\,;\, m_2=j_2, \cdots, -j_2) \tag{7.108}$$

をとりうることになるが，全角運動量 $\hat{\boldsymbol{j}}$ がこれらの状態にどのように作用しているかを調べるのが，本節の目的である．

基本的には，7.4 節の一般論に従って全角運動量 $\hat{\boldsymbol{j}}$ の大きさおよび第 3 成分を同時に対角化すればよい．そのためにまず，第 3 成分 $\hat{j}^3$ の固有値と多重度を調べておこう．$\hat{j}^3$ は $\hat{j}_1^3$ と $\hat{j}_2^3$ の和であるから，明らかに，$|j_1, m_1\rangle|j_2, m_2\rangle$ は $\hat{j}^3$ の固有値 $m=m_1+m_2$ の固有ベクトルである．すなわち，

$$\hat{j}^3|j_1, m_1\rangle|j_2, m_2\rangle=m|j_1, m_1\rangle|j_2, m_2\rangle, \quad m=m_1+m_2 \tag{7.109}$$

m_1 は j_1 から $-j_1$ まで動き，m_2 は j_2 から $-j_2$ まで動くから，明らかにその和 m は (j_1+j_2) から $-(j_1+j_2)$ まで動く．とくに，m が最大値 j_1+j_2 をとるのは $(m_1, m_2)=(j_1, j_2)$ のときだけであるから，その多重度は 1 である．そのつぎの m の値 j_1+j_2-1 は，$(m_1, m_2)=(j_1, j_2-1)$ か $(m_1, m_2)=(j_1-1, j_2)$ のときに得られるから，多重度は 2 である．このように考えていくと，容易につぎの多重度が得られる．

$m=j_1+j_2$	のとき	1	↓ 1ずつ増加
$m=j_1+j_2-1$	のとき	2	
$m=j_1+j_2-2$	のとき	3	
$\vdots$			
$m=\|j_1-j_2\|$	のとき	$j_1+j_2+1-\|j_1-j_2\|$	↕ 一定
$\vdots$			
$m=-\|j_1-j_2\|$	のとき	$j_1+j_2+1-\|j_1-j_2\|$	↑ 1ずつ増加
$\vdots$			
$m=-(j_1+j_2-2)$	のとき	3	
$m=-(j_1+j_2-1)$	のとき	2	
$m=-(j_1+j_2)$	のとき	1	(7.110)

$\hat{j}^3$ の固有値は最大で j_1+j_2 であるから，最大値 j_1+j_2 に対応する状態 $|j_1, j_1\rangle|j_2, j_2\rangle$ に全角運動量の上昇演算子 $\hat{j}^+=\hat{j}^1+i\hat{j}^2$ を作用させたものは 0 のはずである．ところが，7.4 節の一般論によれば，$\hat{j}^3$ の固有値 j の固有ベクトルが $\hat{j}^+$ で消されるならば，それは $\hat{\boldsymbol{j}}^2$ の固有値 $j(j+1)$ の固有ベクトルである．よって，$|j_1, j_1\rangle|j_2, j_2\rangle$ は $\hat{\boldsymbol{j}}^2$ の固有ベクトルであり，その固有値を $j(j+1)$ と書くと，$j=j_1+j_2$ であ

ることがわかった．一般論から知っているように，これに下降演算子を順次作用させると，全部で $2(j_1+j_2)+1$ 個の状態が得られ，それらが角運動量の大きさ j_1+j_2 の表現をつくっている．

つぎに，これら $2(j_1+j_2)+1$ 個の状態を，はじめの空間からとり除いた残りの空間を考えよう．すなわち，上の $2(j_1+j_2)+1$ 個の状態ではられる空間の直交補空間を考える．$\hat{\boldsymbol{j}}$ はエルミートであるから，このような残りの空間は $\hat{\boldsymbol{j}}$ の作用に関して閉じている．とり除いた状態の $\hat{j}^3$ の固有値が，$j_1+j_2, j_1+j_2-1, \cdots, -(j_1+j_2)$ であったことを思いだすと，残りの空間における $\hat{j}^3$ の固有値の多重度は(7.110)からいっせいに 1 だけ引いたものになっていることがわかるだろう．とくに，残りの空間における $\hat{j}^3$ の固有値の最大値は j_1+j_2-1 であり，その多重度は 1 であることがわかる．再び一般論から，そのような状態は $\hat{\boldsymbol{j}}^2$ の固有状態であり，それに下降演算子を順次作用させると，大きさが j_1+j_2-1 の角運動量の表現が得られることがわかる．

このようにして得られる $2(j_1+j_2-1)+1$ 個の状態を，さらにとり除いた空間を考えるといった手続きを繰り返すと，常に $\hat{j}^3$ の最大固有値の多重度が 1 であることは明らかであろう．けっきょく，$\hat{\boldsymbol{j}}^2$ の固有値を $j(j+1)$ と書いたとき，そのとりうる値は，

$$j_1+j_2,\ j_1+j_2-1, \cdots, |j_1-j_2| \tag{7.111}$$

であり，多重度はすべて 1 であることがわかる．これは，古典的には長さが j_1, j_2 の 2 つのベクトル $\boldsymbol{j}_1$, $\boldsymbol{j}_2$ を加えたものの大きさがその間の角度によって j_1+j_2 から $|j_1-j_2|$ まで変わりうることに対応している．

角運動量の表現をその次元で表すことにして，ここで得られた結果を，

$$(2j_1+1)\times(2j_2+1)=(2(j_1+j_2)+1)+(2(j_1+j_2-1)+1)+\cdots+(2|j_1-j_2|+1) \tag{7.112}$$

のように書くことが多い．ここで，左辺は大きさ j_1 と j_2 の角運動量を合成したことを表し，右辺はその結果の合成角運動量の大きさが $(j_1+j_2), \cdots, |j_1-j_2|$ となることを表している．この等式は，合成系の状態空間の次元を 2 つの見方で表したものであり，簡単な計算の結果，たしかに成り立っていることがわかる．

以上によって，合成系の状態は，$\hat{\boldsymbol{j}}^2$ および $\hat{j}^3$ の固有値によって一意的に表されることがわかったので，それらの状態を $|j, m\rangle\!\rangle$ と書くことにしよう．ここで，j は $\hat{\boldsymbol{j}}^2$ の固有値が $j(j+1)$ であることを表し，m は $\hat{j}^3$ の固有値である．また，2 重の線で書いたのは，合成系の状態ベクトルであることを忘れないようにするためである．$|j_1, m_1\rangle|j_2, m_2\rangle$ を $|j, m\rangle\!\rangle$ で展開したときの係数

$$C^{j,m}_{m_1,\ m_2} = \langle\!\langle j, m|j_1, m_1\rangle|j_2, m_2\rangle \tag{7.113}$$

を Clebsch-Gordan 係数とよんでいる．これには，もちろん $|j, m\rangle\!\rangle$ の位相の定義に

関する不定性があることに注意しよう．

例題　2つの電子のスピンを合成せよ．

解　電子はスピン $\frac{1}{2}$ をもっている．スピンが上向きの状態を $|\uparrow\rangle$ と書き，下向きの状態を $|\downarrow\rangle$ と書こう．2つの電子のスピン演算子を $\hat{\boldsymbol{s}}_1$，$\hat{\boldsymbol{s}}_2$，全スピンの演算子を $\hat{\boldsymbol{s}}=\hat{\boldsymbol{s}}_1+\hat{\boldsymbol{s}}_2$ と書き，スピンの状態を $\hat{s}^3$ の固有値で分類しよう．

$$
\begin{array}{lcl}
 & 1 & |\uparrow\rangle|\uparrow\rangle \\
\hat{s}^3 \text{の固有値} & 0 & |\uparrow\rangle|\downarrow\rangle,\ \ |\downarrow\rangle|\uparrow\rangle \\
 & -1 & |\downarrow\rangle|\downarrow\rangle
\end{array}
$$

状態 $|\uparrow\rangle|\uparrow\rangle$ は $\hat{s}^3$ の最大固有値1に対応するから，全スピンの3重項に属している．これに下降演算子 $\hat{s}^-=\hat{s}_1^-+\hat{s}_2^-$ を順次作用させれば，3重項の残りが得られる．実際，

$$
\begin{aligned}
\hat{s}^-|\uparrow\rangle|\uparrow\rangle &= (\hat{s}_1^-+\hat{s}_2^-)|\uparrow\rangle|\uparrow\rangle \\
&= (\hat{s}_1^-|\uparrow\rangle)|\uparrow\rangle+|\uparrow\rangle(\hat{s}_2^-|\uparrow\rangle) \\
&= |\downarrow\rangle|\uparrow\rangle+|\uparrow\rangle|\downarrow\rangle
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
\hat{s}^-(|\downarrow\rangle|\uparrow\rangle+|\uparrow\rangle|\downarrow\rangle) &= (\hat{s}_1^-+\hat{s}_2^-)(|\downarrow\rangle|\uparrow\rangle+|\uparrow\rangle|\downarrow\rangle) \\
&= (\hat{s}_1^-|\downarrow\rangle)|\uparrow\rangle+(\hat{s}_1^-|\uparrow\rangle)|\downarrow\rangle \\
&\quad +|\downarrow\rangle(\hat{s}_2^-|\uparrow\rangle)+|\uparrow\rangle(\hat{s}_2^-|\downarrow\rangle) \\
&= 2|\downarrow\rangle|\downarrow\rangle
\end{aligned}
$$

となるが，これらを規格化して，

$$
\begin{aligned}
|1,1\rangle\!\rangle &= |\uparrow\rangle|\uparrow\rangle \\
|1,0\rangle\!\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\rangle|\downarrow\rangle+|\downarrow\rangle|\uparrow\rangle) \\
|1,-1\rangle\!\rangle &= |\downarrow\rangle|\downarrow\rangle
\end{aligned}
$$

が得られる．これらに直交するものは，全スピンの1重項であり，

$$
|0,0\rangle\!\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\rangle|\downarrow\rangle-|\downarrow\rangle|\uparrow\rangle)
$$

で与えられる．ここで，3重項は2つのスピンの入れかえに対して対称であるが，1重項は反対称になっていることに注意しよう．　▮

［問題5］　電子の1体系の軌道角運動量 $\hat{\boldsymbol{l}}$ とスピン角運動量 $\hat{\boldsymbol{s}}$ を合成せよ．

［解］　電子はスピン $\frac{1}{2}$ をもつから，軌道角運動量の大きさを l とすると，全角運動量の大きさは $l+\frac{1}{2}$ か $l-\frac{1}{2}$ である．ここで，(7.89 c)を繰り返し使うと，

一般に,

$$|j, m\rangle=\sqrt{\frac{(j+m)!}{(2j)!(j-m)!}}(\hat{j}^{-})^{j-m}|j, j\rangle \qquad ⓐ$$

と書けることに注意しよう．これを $j=l+\dfrac{1}{2}$ の場合に適用すると,

$$\left|l+\frac{1}{2},\ m\right\rangle\!\!\rangle =\left(\frac{\left(l+\frac{1}{2}+m\right)!}{(2l+1)!\left(l+\frac{1}{2}-m\right)!}\right)^{\frac{1}{2}}(\hat{l}^{-}+\hat{s}^{-})^{l+\frac{1}{2}-m}\left|l+\frac{1}{2},\ l+\frac{1}{2}\right\rangle\!\!\rangle \qquad ⓑ$$

となるが, $\left|l+\frac{1}{2},\ l+\frac{1}{2}\right\rangle\!\!\rangle$ は $|l,\ l\rangle\left|\frac{1}{2},\ \frac{1}{2}\right\rangle$ に等しいから, $\hat{s}^{-}$ を2つ以上作用させたものはゼロである．このことに注意して，公式ⓐを再び使うと,

$$\begin{aligned}
&(\hat{l}^{-}+\hat{s}^{-})^{l+\frac{1}{2}-m}\left|l+\frac{1}{2}, l+\frac{1}{2}\right\rangle\!\!\rangle\\
&=\left((\hat{l}^{-})^{l+\frac{1}{2}-m}|l, l\rangle\right)\left|\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right\rangle+\left(l+\frac{1}{2}-m\right)\left((\hat{l}^{-})^{l-\frac{1}{2}-m}|l, l\rangle\right)\left(\hat{s}^{-}\left|\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right\rangle\right)\\
&=\left(\frac{(2l)!\left(l-m+\frac{1}{2}\right)!}{\left(l+m-\frac{1}{2}\right)!}\right)^{\frac{1}{2}}\left|l, m-\frac{1}{2}\right\rangle\left|\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right\rangle\\
&\quad+\left(l+\frac{1}{2}-m\right)\left(\frac{(2l)!\left(l-m-\frac{1}{2}\right)!}{\left(l+m+\frac{1}{2}\right)!}\right)^{\frac{1}{2}}\left|l, m+\frac{1}{2}\right\rangle\left|\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\right\rangle
\end{aligned}$$

のように計算できる．これをⓑに代入すると，けっきょく,

$$\begin{aligned}
\left|l+\frac{1}{2}, m\right\rangle\!\!\rangle &=\left(\frac{l+\frac{1}{2}+m}{2l+1}\right)^{\frac{1}{2}}\left|l, m-\frac{1}{2}\right\rangle\left|\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right\rangle\\
&\quad+\left(\frac{l+\frac{1}{2}-m}{2l+1}\right)^{\frac{1}{2}}\left|l, m+\frac{1}{2}\right\rangle\left|\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\right\rangle \qquad ⓒ
\end{aligned}$$

が得られる．

$j=l-\dfrac{1}{2}$ の状態ベクトルは, m の各値ごとにⓒと直交するものであるから，それらを1に規格化されているように選ぶと,

$$|l-\frac{1}{2}, m\rangle\!\rangle = \left(\frac{l+\frac{1}{2}-m}{2l+1}\right)^{\frac{1}{2}} |l, m-\frac{1}{2}\rangle |\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle$$

$$-\left(\frac{l+\frac{1}{2}+m}{2l+1}\right)^{\frac{1}{2}} |l, m+\frac{1}{2}\rangle |\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle \qquad ⓓ$$

であることがわかる．異なる m の値をもつ状態の間の相対位相を調べるためには，$\hat{j}^{-}=\hat{l}^{-}+\hat{s}^{-}$ を ⓓ の両辺に作用させてみればよい．少し計算すると，たしかに，$\hat{j}^{-}|l-\frac{1}{2},m\rangle\!\rangle=$(正の数)$\times|l-\frac{1}{2},m-1\rangle\!\rangle$となっており，ⓓは通常の位相の選び方と一致していることがわかる．(246 ページの脚注参照)．

$|j, m\rangle\!\rangle$ $(j=l\pm\frac{1}{2})$ の軌道部分を極座標で表示し，スピン部分は，$|\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle$, $|\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle$をそれぞれ$\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}$, $\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}$で表示したものを，$\mathscr{Y}_l^{j,m}$ と書き，球面スピノルとよぶ．ⓒ，ⓓより，

$$\mathscr{Y}_l^{l+\frac{1}{2},m}(\theta,\varphi)=\begin{pmatrix} \left(\frac{l+\frac{1}{2}+m}{2l+1}\right)^{\frac{1}{2}} Y_l^{m-\frac{1}{2}}(\theta,\varphi) \\ \left(\frac{l+\frac{1}{2}-m}{2l+1}\right)^{\frac{1}{2}} Y_l^{m+\frac{1}{2}}(\theta,\varphi) \end{pmatrix}$$

$$\mathscr{Y}_l^{l-\frac{1}{2},m}(\theta,\varphi)=\begin{pmatrix} \left(\frac{l+\frac{1}{2}-m}{2l+1}\right)^{\frac{1}{2}} Y_l^{m-\frac{1}{2}}(\theta,\varphi) \\ -\left(\frac{l+\frac{1}{2}+m}{2l+1}\right)^{\frac{1}{2}} Y_l^{m+\frac{1}{2}}(\theta,\varphi) \end{pmatrix}$$

と書けることがわかる．　▮

7.7　その他の対称性

ここまでの議論では，対称性とはユニタリー変換に対するハミルトニアンの不変性のことであるとした．しかしながら，いくつかの重要な対称性は必ずしもこのカテゴリーに属さないので，以下で個別に調べておこう．

時間の一様性とエネルギー保存則

時間の流れが一様である，すなわち自然現象を記述する法則は時間に依存しないと考えるのは自然である．これを量子力学の枠組みで表現すると，ハミルトニアンの形が時間によらずに定まっている，すなわちハミルトニアンが時間を陽に含まないということになるだろう．これまで何度もみてきたように，そのような場合にはハミルトニアンの固有値は時間によらずに一定であり，系の全エネルギーを表す．このように考えると，エネルギーの保存則は時間の一様性の帰結であるといえる．この主張は形式的には，運動量の保存則が空間の一様性の帰結であるというのに似ているが，量子力学の枠組みのなかでは少しちがった現れ方をしていることに注意しよう．実際，並進の演算子 $\exp\left(\frac{1}{i\hbar}\boldsymbol{a}\cdot\hat{\boldsymbol{p}}\right)$ は位置の演算子 $\hat{\boldsymbol{x}}$ を $\hat{\boldsymbol{x}}+\boldsymbol{a}$ に写すようなユニタリー変換であるが，時間 t は演算子ではないから時間推進の演算子，すなわち $\exp\left(\frac{1}{i\hbar}\Delta t\hat{H}\right)$ を t を $t+\Delta t$ に写すユニタリー変換とみなすことはできない．

時間反転

時間の向きを逆にするような変換を考えてみよう．古典論的には，ある瞬間でみた場合，そのような変換に対して各粒子の位置 $\boldsymbol{r}_i$ は変わらないが，運動量 $\boldsymbol{p}_i$ は逆向きになるはずである．すなわち，

$$\boldsymbol{r}_i \longmapsto \boldsymbol{r}_i, \quad \boldsymbol{p}_i \longmapsto -\boldsymbol{p}_i \tag{7.114}$$

量子力学でこれに相当する変換を考えるために，つぎのような性質をみたす演算子 $\hat{T}$ を導入しよう．

$$\hat{T}^\dagger \hat{\boldsymbol{r}}_i \hat{T} = \hat{\boldsymbol{r}}_i, \quad \hat{T}^\dagger \hat{\boldsymbol{p}}_i \hat{T} = -\hat{\boldsymbol{p}}_i \tag{7.115}$$

状態ベクトル $|\psi\rangle$ を $\hat{T}|\psi\rangle$ に写す変換を考えると，(7.114)が期待値の意味で成り立っていることはすぐにわかる．実際，変換 $|\psi\rangle \longmapsto \hat{T}|\psi\rangle$ に対して，$\hat{\boldsymbol{r}}_i$，$\hat{\boldsymbol{p}}_i$ の期待値は，

$$\langle\psi|\hat{\boldsymbol{r}}_i|\psi\rangle \longmapsto \langle\psi|\hat{T}^\dagger \hat{\boldsymbol{r}}_i \hat{T}|\psi\rangle = \langle\psi|\hat{\boldsymbol{r}}_i|\psi\rangle, \tag{7.116 a}$$

$$\langle\psi|\hat{\boldsymbol{p}}_i|\psi\rangle \longmapsto \langle\psi|\hat{T}^\dagger \hat{\boldsymbol{p}}_i \hat{T}|\psi\rangle = -\langle\psi|\hat{\boldsymbol{p}}_i|\psi\rangle \tag{7.116 b}$$

のように変わる．

状態ベクトルのノルムが変換前と変換後で等しいためには，$\langle\psi|\hat{T}^\dagger\hat{T}|\psi\rangle = \langle\psi|\psi\rangle$ より，

$$\hat{T}^\dagger \hat{T} = 1 \tag{7.117}$$

が成り立つべきであるから，$\hat{T}$ はユニタリー演算子であるのが望ましいと思われる．ところが，ユニタリーな $\hat{T}$ に対しては，(7.115)は決して成り立たないことがわ

かる．なぜならば，もし $\hat{T}$ がユニタリーであるとすると，(7.115) より

$$
\begin{aligned}
[\hat{r}_i^a, \hat{p}_j^b] &= [\hat{T}^\dagger \hat{r}_i^a \hat{T},\ -\hat{T}^\dagger \hat{p}_j^b \hat{T}] \\
&= -\hat{T}^\dagger \hat{r}_i^a \hat{T}\hat{T}^\dagger \hat{p}_j^b \hat{T} + \hat{T}^\dagger \hat{p}_j^b \hat{T}\hat{T}^\dagger \hat{r}_i^a \hat{T} \\
&= \hat{T}^\dagger [\hat{p}_j^b, \hat{r}_i^a] \hat{T}
\end{aligned}
\tag{7.118}
$$

となるが，左辺は $i\hbar\delta_{ij}\delta^{ab}$ であり，右辺はその符号を変えたものになってしまうからである．

これを避けるためには，$\hat{T}$を反ユニタリー演算子と考えればよい．すなわち，$\hat{T}$ は状態空間V上の変換であり，つぎの性質をみたしているものとする．

(i) 反線型性

$$\hat{T}(\lambda|\psi\rangle + \mu|\psi\rangle) = \lambda^* \hat{T}|\psi\rangle + \mu^* \hat{T}|\psi\rangle \tag{7.119 a}$$

(ii) ユニタリー性

$$\hat{T}^\dagger \hat{T} = \hat{T}\hat{T}^\dagger = 1 \tag{7.119 b}$$

ここで，(7.119 a)の右辺には λ，μ の複素共役 λ^*, μ^* が現れている点に注意しよう．このような演算子は一見奇妙に思うかもしれないが，じつは頻繁に使っているのであって，たとえば複素 n 次元ベクトル $(v_1, v_2, \cdots, v_n)$ に対してその複素共役 $(v_1^*, v_2^*, \cdots, v_n^*)$ を対応させる変換は明らかに反ユニタリーである．また，(7.119 b)の意味をきちんと定義するためには反線型演算子 $\hat{T}$ のエルミート共役 $\hat{T}^\dagger$ が必要であるが，それは，任意の $|u\rangle, |v\rangle$ に対して，

$$\langle u|(\hat{T}^\dagger|v\rangle) = \langle v|(\hat{T}|u\rangle) \tag{7.120}$$

をみたすものとして定義される．ここで，普通の線型演算子の場合とちがい右辺で複素共役をとることはしないが，そのおかげで，両辺は $|u\rangle, |v\rangle$ について反線型になり，(7.120)から矛盾なく反線型演算子 $\hat{T}^\dagger$ が定義できるわけである．

系がスピンの自由度をもたない場合は，(7.115)をみたす反ユニタリーな $\hat{T}$ を構成するのは簡単である．実際，座標表示のケットに対して，

$$\hat{T}|\boldsymbol{r}_1', \cdots, \boldsymbol{r}_N'\rangle = |\boldsymbol{r}_1', \cdots, \boldsymbol{r}_N'\rangle \tag{7.121}$$

で $\hat{T}$ を定義すると，$\hat{T}$ および $\hat{T}^\dagger = \hat{T}^{-1}$ の反線型性より，

$$
\begin{aligned}
\hat{T}^\dagger \hat{\boldsymbol{r}}_i \hat{T}|\boldsymbol{r}_1', \cdots, \boldsymbol{r}_N'\rangle &= \hat{T}^\dagger \hat{\boldsymbol{r}}_i|\boldsymbol{r}_1', \cdots, \boldsymbol{r}_N'\rangle = \hat{T}^\dagger \boldsymbol{r}_i'|\boldsymbol{r}_1', \cdots, \boldsymbol{r}_N'\rangle \\
&= \boldsymbol{r}_i' \hat{T}^\dagger|\boldsymbol{r}_1', \cdots, \boldsymbol{r}_N'\rangle = \boldsymbol{r}_i'|\boldsymbol{r}_1', \cdots, \boldsymbol{r}_N'\rangle \\
&= \hat{\boldsymbol{r}}_i|\boldsymbol{r}_1', \cdots, \boldsymbol{r}_N'\rangle
\end{aligned}
\tag{7.122 a}
$$

$$
\begin{aligned}
\hat{T}^\dagger \hat{\boldsymbol{p}}_i \hat{T}|\boldsymbol{r}_1', \cdots, \boldsymbol{r}_N'\rangle &= \hat{T}^\dagger \hat{\boldsymbol{p}}_i|\boldsymbol{r}_1', \cdots, \boldsymbol{r}_N'\rangle = \hat{T}^\dagger i\hbar\frac{\partial}{\partial \boldsymbol{r}_i'}|\boldsymbol{r}_1', \cdots, \boldsymbol{r}_N'\rangle \\
&= -i\hbar\frac{\partial}{\partial \boldsymbol{r}_i'}\hat{T}^\dagger|\boldsymbol{r}_1', \cdots, \boldsymbol{r}_N'\rangle = -i\hbar\frac{\partial}{\partial \boldsymbol{r}_i'}|\boldsymbol{r}_i', \cdots, \boldsymbol{r}_N'\rangle
\end{aligned}
$$

$$= -\hat{\boldsymbol{p}}_i | \boldsymbol{r}_1', \cdots, \boldsymbol{r}_N' \rangle \tag{7.122 b}$$

となり，たしかに(7.115)がみたされている．ところで，(7.121)と $\hat{T}$ の反線型性より，任意の $|\psi\rangle$ に対して，

$$\hat{T}|\psi\rangle = \hat{T}\left(\int d^3r_1'' \cdots d^3r_N'' | \boldsymbol{r}_1'', \cdots, \boldsymbol{r}_N'' \rangle \langle \boldsymbol{r}_1'', \cdots, \boldsymbol{r}_N'' | \psi \rangle\right)$$
$$= \int d^3r_1'' \cdots d^3r_N'' | \boldsymbol{r}_1'', \cdots, \boldsymbol{r}_N'' \rangle (\langle \boldsymbol{r}_1'', \cdots, \boldsymbol{r}_N'' | \psi \rangle)^* \tag{7.123}$$

が得られるが，この両辺を $\langle \boldsymbol{r}_1', \cdots, \boldsymbol{r}_N' |$ と縮約すると，

$$\langle \boldsymbol{r}_1', \cdots, \boldsymbol{r}_N' | \hat{T} | \psi \rangle = (\langle \boldsymbol{r}_1', \cdots, \boldsymbol{r}_N' | \psi \rangle)^* \tag{7.124}$$

となる．これは，座標表示では時間反転は複素共役にほかならないことを示している．

$\hat{T}$ は瞬間的な時間反転を表すものと考えられるから，時間発展している状態ベクトル $|\psi(t)\rangle$ を時間反転させたものは，$|\psi'(t)\rangle = \hat{T}|\psi(-t)\rangle$ で与えられるはずである．ところで，$|\psi(t)\rangle$ が Schrödinger 方程式

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle = \hat{H} |\psi(t)\rangle \tag{7.125}$$

をみたしているとすると，$|\psi'(t)\rangle$ は，

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi'(t)\rangle = \hat{H}' |\psi'(t)\rangle, \tag{7.126 a}$$

$$\hat{H}' = \hat{T}\hat{H}\hat{T}^{-1} \tag{7.126 b}$$

をみたしていることがわかる．実際，$\hat{T}$ の反線型性に注意して計算すると，

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi'(t)\rangle = i\hbar \frac{d}{dt} \hat{T} |\psi(-t)\rangle = \hat{T}(-i\hbar) \frac{d}{dt} |\psi(-t)\rangle$$
$$= \hat{T}\hat{H} |\psi(-t)\rangle = \hat{T}\hat{H}\hat{T}^{-1}\hat{T} |\psi(-t)\rangle$$
$$= \hat{T}\hat{H}\hat{T}^{-1} |\psi'(t)\rangle \tag{7.127}$$

が得られる．

系が時間反転に対して不変であるということは，$|\psi(t)\rangle$ が系の Schrödinger 方程式の解であれば，$|\psi'(t)\rangle = \hat{T}|\psi(-t)\rangle$ も解であることを意味しており，けっきょくそれは，

$$\hat{T}\hat{H}\hat{T}^{-1} = \hat{H} \tag{7.128}$$

が成り立つということである．これは前の 7.6 節までの一般論と似ているが，ここでは $\hat{T}$ はユニタリーではなくて反ユニタリーであることに注意しよう．(7.127)の計算からわかるように，$\hat{T}$ が反ユニタリーであるおかげで t の符号が変わったのである．

わずかな効果ではあるが，自然界の法則がじつは時間反転に対する対称性を破っていることが，弱い相互作用の研究から知られている．しかしながら，原子物理や物性物理で扱うようなエネルギーが数 eV 程度の領域では，そのような効果は非常に小さいので，通常は時間反転に対する対称性があるものとしてさしつかえない．

最後に，スピンがあるときの時間反転を議論しておこう．一般に軌道角運動量は $\sum_i \boldsymbol{r}_i \times \boldsymbol{p}_i$ の形をしているから，時間反転に対して符号を変える．スピンも角運動量の1種であるから，時間反転で符号を変えると考えるのが自然であろう．すなわち，各粒子が力学的な自由度として位置 $\hat{\boldsymbol{r}}_i$, 運動量 $\hat{\boldsymbol{p}}_i$ 以外にスピン $\hat{\boldsymbol{s}}_i$ をもつ場合には，時間反転の演算子 $\hat{T}$ は，(7.115)に加えて，

$$\hat{T}^\dagger \hat{\boldsymbol{s}}_i \hat{T} = -\hat{\boldsymbol{s}}_i \tag{7.129}$$

をみたす反ユニタリー演算子として定義すればよい．

$\hat{T}$ がスピン自由度にどのように作用しているかを具体的に書きくだしてみよう．簡単のため，しばらくの間1つの粒子のスピンだけを考え，それを $\hat{\boldsymbol{s}}$ と書こう．まず，(7.129)および $\hat{T}$ の反線型性から，

$$\hat{T}^\dagger \hat{s}^3 \hat{T} = -\hat{s}^3 \tag{7.130 a}$$

$$\hat{T}^\dagger \hat{s}^+ \hat{T} = -\hat{s}^- \tag{7.130 b}$$

$$\hat{T}^\dagger \hat{s}^- \hat{T} = -\hat{s}^+ \tag{7.130 c}$$

が得られることに注意しよう．たとえば(7.130 b)は，

$$\begin{aligned}\hat{T}^\dagger \hat{s}^+ \hat{T} &= \hat{T}^\dagger (\hat{s}^1 + i\hat{s}^2) \hat{T} \\ &= \hat{T}^\dagger \hat{s}^1 \hat{T} - i\hat{T}^\dagger \hat{s}^2 \hat{T} \\ &= -\hat{s}^1 + i\hat{s}^2 \\ &= -\hat{s}^-\end{aligned}$$

のようにして得られる．ここで1行目から2行目へ移るときに $\hat{T}$ の反線型性を使った．

(7.130 a)からわかるように，$\hat{T}$ は $\hat{s}^3$ の固有値の符号を変えるから，

$$\hat{T}\,|s, s_z\rangle = (\text{位相因子}) \times |s, -s_z\rangle \tag{7.131}$$

となっているはずであるが，とくに $s_z = s$ の場合には，

$$\hat{T}\,|s, s\rangle = |s, -s\rangle \tag{7.132}$$

となるように $\hat{T}$ を定義しておこう．さらに，$|s, s_z\rangle$ は通常どおり

$$|s, s_z\rangle = (\text{正の数}) \times (\hat{s}^-)^{s-s_z} |s, s\rangle \tag{7.133}$$

のように位相が選ばれているとすると，

$$\hat{T}\,|s, s_z\rangle = (\text{正の数}) \times \hat{T}(\hat{s}^-)^{s-s_z} |s, s\rangle$$

$$\begin{aligned}
&=(\text{正の数})\times(\hat{T}\hat{s}^{-}\hat{T}^{-1})^{s-s_z}\hat{T}\,|\,s,s\rangle \\
&=(\text{正の数})\times(-1)^{s-s_z}(\hat{s}^{+})^{s-s_z}\hat{T}\,|\,s,s\rangle \\
&=(\text{正の数})\times(-1)^{s-s_z}(\hat{s}^{+})^{s-s_z}\,|\,s,-s\rangle \\
&=(\text{正の数})'\times(-1)^{s-s_z}\,|\,s,-s_z\rangle \qquad (7.134)
\end{aligned}$$

となるはずである．$\hat{T}$ はノルムを変えないから，けっきょく，

$$\hat{T}\,|\,s,s_z\rangle=(-1)^{s-s_z}\,|\,s,-s_z\rangle \qquad (7.135)$$

が得られる．スピンをもつ粒子がいくつかある場合には，おのおののスピン自由度が(7.135)のように変換するとしてやればよい．

例題1　(1) 2成分スピノル場 $\boldsymbol{\psi}(\boldsymbol{x},t)=\begin{pmatrix}\psi_1(\boldsymbol{x},t)\\ \psi_2(\boldsymbol{x},t)\end{pmatrix}$ に対する時間反転はどう書けるか．

(2) スピン $\dfrac{1}{2}$ をもつ自由粒子の Schrödinger 方程式

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\boldsymbol{\psi}(\boldsymbol{x},t)=-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\boldsymbol{\psi}(\boldsymbol{x},t) \qquad ①$$

が時間反転に対して不変であることを示せ．

解　(1) (7.124)および(7.135)で $s=\dfrac{1}{2}$ の場合から，$\boldsymbol{\psi}(\boldsymbol{x},t)$ の時間反転 $\boldsymbol{\psi}'(\boldsymbol{x},t)$ は，

$$\boldsymbol{\psi}'(\boldsymbol{x},t)=\begin{pmatrix}-\psi_2{}^*(\boldsymbol{x},-t)\\ \psi_1{}^*(\boldsymbol{x},-t)\end{pmatrix}=-i\sigma_2\boldsymbol{\psi}(\boldsymbol{x},-t)^*$$

で与えられることがわかる．

(2) ①の両辺の t を $-t$ に書きかえ，複素共役をとって $-i\sigma_2$ を作用させると，

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\boldsymbol{\psi}'(\boldsymbol{x},t)=-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\boldsymbol{\psi}'(\boldsymbol{x},t)$$

となるが，これは①と同じ形である．　▮

Galilei 変換に対する不変性

すべての慣性系が等価であること，すなわちどのような慣性系で記述しても物理法則が同じ形をとるという主張は相対性原理とよばれており，現在まで知られているかぎり疑う余地はない．2つの慣性系における時間および空間座標の間の関係をつけるのが Lorentz 変換であるが，その非相対論的な極限，すなわち2つの慣性系の相対速度 $\boldsymbol{V}$ が光速に比べて小さい場合の近似を Galilei 変換とよんでいる．N 個の粒子からなる系を考え，それらの質量，座標，運動量を $m_i, \boldsymbol{r}_i, \boldsymbol{p}_i\ (i=1,2,\cdots,N)$ とすると，Galilei 変換は，

$$t \mapsto t' = t \tag{7.136 a}$$

$$\boldsymbol{r}_i \mapsto \boldsymbol{r}_i' = \boldsymbol{r}_i + \boldsymbol{V}t \tag{7.136 b}$$

$$\boldsymbol{p}_i \mapsto \boldsymbol{p}_i' = \boldsymbol{p}_i + m_i \boldsymbol{V} \tag{7.136 c}$$

と表される．

量子力学でこれに対応するものを考えるためには，つぎのような性質をみたすユニタリー演算子 $\hat{U}(\boldsymbol{V})$ を考えればよい．

$$\hat{U}(\boldsymbol{V})^{-1}\hat{\boldsymbol{r}}_i\hat{U}(\boldsymbol{V}) = \hat{\boldsymbol{r}}_i + \boldsymbol{V}t, \tag{7.137 a}$$

$$\hat{U}(\boldsymbol{V})^{-1}\hat{\boldsymbol{p}}_i\hat{U}(\boldsymbol{V}) = \hat{\boldsymbol{p}}_i + m_i\boldsymbol{V} \tag{7.137 b}$$

状態ベクトル $|\psi\rangle$ を $\hat{U}(\boldsymbol{V})|\psi\rangle$ に写す変換を考えると，期待値の意味で(7.136)が成り立っているのは明らかであろう．

$\hat{U}(\boldsymbol{V})$ の生成子，すなわち小さな $\boldsymbol{V}$ に対して，

$$\hat{U}(\boldsymbol{V}) = 1 + \frac{1}{i\hbar}\boldsymbol{V}\cdot\hat{\boldsymbol{B}} + O(\boldsymbol{V}^2) \tag{7.138}$$

と書いたときの $\hat{\boldsymbol{B}}$ をブーストの演算子とよぶ．(7.137) および(7.138) から，$\hat{\boldsymbol{B}}$ は，

$$\frac{1}{i\hbar}[\hat{r}_i^a, \hat{B}^b] = \delta^{ab}t \tag{7.139 a}$$

$$\frac{1}{i\hbar}[\hat{p}_i^a, \hat{B}^b] = \delta^{ab}m_i \tag{7.139 b}$$

をみたすべきであることがわかるが，そのためには，

$$\hat{\boldsymbol{B}} = \hat{\boldsymbol{P}}t - \sum_{i=1}^{N} m_i\hat{\boldsymbol{r}}_i \tag{7.140}$$

とすればよい．ここで，$\hat{\boldsymbol{P}} = \sum_{i=1}^{N}\hat{\boldsymbol{p}}_i$ は全運動量である．また，交換子が c 数であるような 2 つの演算子 $\hat{A}, \hat{B}$ に対して成り立つ公式 $\exp(\hat{A}+\hat{B}) = \exp\left(-\frac{1}{2}[\hat{A}, \hat{B}]\right)\exp(\hat{A})\exp(\hat{B})$ を使うと，有限の $\boldsymbol{V}$ に対する $\hat{U}(\boldsymbol{V})$ は，

$$\hat{U}(\boldsymbol{V}) = \exp\left(\frac{1}{i\hbar}\boldsymbol{V}\cdot\hat{\boldsymbol{B}}\right) = \exp\left(\frac{1}{i\hbar}\boldsymbol{V}\cdot\left(\hat{\boldsymbol{P}}t - \sum_{i=1}^{N} m_i\hat{\boldsymbol{r}}_i\right)\right)$$

$$= \exp\left(\frac{1}{i\hbar}\frac{1}{2}M\boldsymbol{V}^2 t\right)\exp\left(-\frac{1}{i\hbar}\boldsymbol{V}\cdot\sum_{i=1}^{N} m_i\hat{\boldsymbol{r}}_i\right)\exp\left(\frac{1}{i\hbar}\boldsymbol{V}\cdot\hat{\boldsymbol{P}}t\right) \tag{7.141a}$$

$$= \exp\left(\frac{i}{\hbar}\frac{1}{2}M\boldsymbol{V}^2 t\right)\exp\left(\frac{1}{i\hbar}\boldsymbol{V}\cdot\hat{\boldsymbol{P}}t\right)\exp\left(-\frac{1}{i\hbar}\boldsymbol{V}\cdot\sum_{i=1}^{N} m_i\hat{\boldsymbol{r}}_i\right) \tag{7.141 b}$$

と表される．ここで，$M = \sum_{i=1}^{N} m_i$ は全質量である．

$|\psi(t)\rangle$ が Schrödinger 方程式

$$i\hbar\frac{d}{dt}|\psi(t)\rangle = \hat{H}|\psi(t)\rangle \tag{7.142}$$

の解であるとき，それにGalilei変換を施したもの

$$|\psi'(t)\rangle=\hat{U}(\boldsymbol{V})|\psi(t)\rangle \tag{7.143}$$

がどのような方程式をみたすかを考えよう．$\hat{U}(\boldsymbol{V})$ は，(7.141)に与えられているように陽に t を含んでいることに注意して計算すると，

$$\begin{aligned} i\hbar\frac{d}{dt}|\psi'(t)\rangle&=i\hbar\frac{d}{dt}(\hat{U}(\boldsymbol{V})|\psi(t)\rangle)\\ &=i\hbar\left(\frac{d}{dt}\hat{U}(\boldsymbol{V})\right)|\psi(t)\rangle+i\hbar\hat{U}(\boldsymbol{V})\frac{d}{dt}|\psi(t)\rangle \end{aligned} \tag{7.144}$$

となる．右辺第1項では，(7.141 b)より得られる式

$$i\hbar\frac{d}{dt}\hat{U}(\boldsymbol{V})=\boldsymbol{V}\cdot\hat{\boldsymbol{P}}\,\hat{U}(\boldsymbol{V})-\frac{1}{2}M\boldsymbol{V}^2\hat{U}(\boldsymbol{V}) \tag{7.145}$$

を使い，第2項では(7.142)を使うと，けっきょく，

$$\begin{aligned} &i\hbar\frac{d}{dt}|\psi'(t)\rangle=\hat{H}'|\psi'(t)\rangle,\\ &\hat{H}'=\hat{U}(\boldsymbol{V})\hat{H}\hat{U}(\boldsymbol{V})^{-1}+\boldsymbol{V}\cdot\hat{\boldsymbol{P}}-\frac{1}{2}M\boldsymbol{V}^2 \end{aligned} \tag{7.146}$$

が得られる．

とくに，系がGalilei変換に対して不変であれば，変換後のハミルトニアン $\hat{H}'$ は変換前のもの $\hat{H}$ に等しいはずであり，

$$\hat{U}(\boldsymbol{V})\hat{H}\hat{U}(\boldsymbol{V})^{-1}+\boldsymbol{V}\cdot\hat{\boldsymbol{P}}-\frac{1}{2}M\boldsymbol{V}^2=\hat{H} \tag{7.147}$$

が成り立っている．とくに無限小変換を考えると，この式は，

$$\frac{1}{i\hbar}[\hat{\boldsymbol{B}},\hat{H}]+\hat{\boldsymbol{P}}=0 \tag{7.148}$$

となるが，(7.140)より $\hat{\boldsymbol{P}}=\dfrac{\partial\hat{\boldsymbol{B}}}{\partial t}$ と書けることに注意すると，

$$\frac{\partial}{\partial t}\hat{\boldsymbol{B}}+\frac{1}{i\hbar}[\hat{\boldsymbol{B}},\hat{H}]=0 \tag{7.149}$$

が得られる．これは，t を陽に含む演算子 $\hat{\boldsymbol{B}}$ が保存することを意味している．(7.140)を，

$$\frac{1}{M}\sum_{i=1}^{N}m_i\hat{\boldsymbol{r}}_i=\frac{\hat{\boldsymbol{P}}}{M}t-\frac{\hat{\boldsymbol{B}}}{M} \tag{7.150}$$

と書きかえると，左辺は系の重心の位置であり，$\hat{\boldsymbol{P}}$ と $\hat{\boldsymbol{B}}$ が保存するということは，重心が等速直線運動をすることを示していることがわかる．

例題2　自由粒子のSchrödinger方程式

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(\boldsymbol{r},t)=-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi(\boldsymbol{r},t) \qquad ①$$

を考える.

(1) $\psi(\boldsymbol{r},t)$ は Galilei 変換でどのように変わるか.

(2) ①がその Galilei 変換に対して不変であることを，平面波に対して具体的にチェックせよ.

解 (1) $\psi(\boldsymbol{r},t)$ に Galilei 変換を施したものを $\psi'(\boldsymbol{r},t)$ とすると，(7.141 a) より，

$$\psi'(\boldsymbol{r},t)=\exp\left(-\frac{i}{\hbar}\frac{1}{2}m\boldsymbol{V}^2t\right)\exp\left(\frac{i}{\hbar}m\boldsymbol{V}\cdot\boldsymbol{r}\right)\exp\left(-t\boldsymbol{V}\cdot\frac{\partial}{\partial\boldsymbol{r}}\right)\psi(\boldsymbol{r},t)$$

$$=\exp\left(-\frac{i}{\hbar}\frac{1}{2}m\boldsymbol{V}^2t+\frac{i}{\hbar}m\boldsymbol{V}\cdot\boldsymbol{r}\right)\psi(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{V}t,t)$$

であることがわかる.

(2) 運動量 $\boldsymbol{p}$ をもつ①の平面波解

$$\psi(\boldsymbol{r},t)=\exp\left(-\frac{i}{\hbar}\frac{\boldsymbol{p}^2}{2m}t+\frac{i}{\hbar}\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}\right)$$

に Galilei 変換を施すと，(1)の結果より，

$$\psi'(\boldsymbol{r},t)=\exp\left(-\frac{i}{\hbar}\frac{1}{2}m\boldsymbol{V}^2t+\frac{i}{\hbar}m\boldsymbol{V}\cdot\boldsymbol{r}\right)\exp\left(-\frac{i}{\hbar}\frac{\boldsymbol{p}^2}{2m}t+\frac{i}{\hbar}\boldsymbol{p}\cdot(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{V}t)\right)$$

$$=\exp\left(-\frac{i}{\hbar}\frac{1}{2m}(\boldsymbol{p}+m\boldsymbol{V})^2t+\frac{i}{\hbar}(\boldsymbol{p}+m\boldsymbol{V})\cdot\boldsymbol{r}\right)$$

となる．これは運動量 $\boldsymbol{p}+m\boldsymbol{V}$ の平面波であり，たしかに①の解である． ∎

第7章 章 末 問 題

[1] ベクトル空間 V 上の線型変換全体のなすベクトル空間を $M(V)$ と書くことにする．V 上の線型変換 A に対して，$M(V)$ 上の線型変換 $\mathrm{adj}(A)$ を，

$$\mathrm{adj}(A)X=[A,X],\quad X\in M(V) \qquad ①$$

で定義し，V 上の逆をもつ線型変換 F に対して，$M(V)$ 上の線型変換 $\mathrm{Adj}(F)$ を，

$$\mathrm{Adj}(F)X=FXF^{-1}, X\in M(V) \qquad ②$$

で定義する.

(1) $\mathrm{Adj}(e^A)=e^{\mathrm{adj}(A)}$ を示せ. ③

(2) 線型変換 A が，微小量 δA だけ変化したときの e^A の変化を δe^A と書こう．δA の1次までで，

$$(\delta e^A)e^{-A}=\Phi(\mathrm{adj}(A))\delta A \qquad ④$$

$$e^{-A}\delta e^A=\Phi(-\mathrm{adj}(A))\delta A \qquad ⑤$$

と書けることを示せ．ただし，$\Phi(x)=\dfrac{e^x-1}{x}$ とする．

(3) 恒等変換1のそばの線型変換Fが，微小量 δF だけ変化したときの $\log F$ の変化を $\delta\log F$ と書こう．δF の1次までで，

$$\delta\log F=\psi(\mathrm{Adj}(F))((\delta F)F^{-1}) \quad ⑥$$

$$\delta\log F=\psi(\mathrm{Adj}(F^{-1}))(F^{-1}\delta F) \quad ⑦$$

と書けることを示せ．ただし，$\psi(y)=\dfrac{\log y}{y-1}$ とする．

［解］ (1) $f(t)=e^{tA}Xe^{-tA}$ を t について n 回微分すると，

$$\frac{d^n}{dt^n}f(t)\bigg|_{t=0}=\underbrace{[A\cdots[A,\ [A,}_{n\text{個}}\ X]]\cdots]=\mathrm{adj}(A)^nX$$

が得られる．これは，

$$\begin{aligned}\mathrm{Adj}(e^A)X&=e^AXe^{-A}=f(t=1)\\&=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{n!}\frac{d^n}{dt^n}f(t)\bigg|_{t=0}=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{n!}\mathrm{adj}(A)^nX\\&=e^{\mathrm{adj}(A)}X\end{aligned}$$

を意味している．

(2) $g(t)=e^{t(A+\delta A)}e^{-tA}$ とおいて，t で微分すると，

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt}g(t)&=e^{t(A+\delta A)}\delta Ae^{-tA}=e^{tA}\delta Ae^{-tA}+O(\delta A^2)\\&=e^{t\,\mathrm{adj}(A)}\delta A+O(\delta A^2)\end{aligned}$$

が得られる．この両辺を t について0から1まで積分すると，

$$g(1)-g(0)=\int_0^1 dt\ e^{t\,\mathrm{adj}(A)}\delta A+O(\delta A^2)$$

となり④が得られる．④の両辺に左から e^{-A} をかけ，右から e^A をかけると，

$$\begin{aligned}e^{-A}\delta e^A&=e^{-A}(\Phi(\mathrm{adj}(A))\delta A)e^A\\&=(e^{-\mathrm{adj}(A)}\Phi(\mathrm{adj}(A)))\delta A\end{aligned}$$

となるが，$\Phi(x)=\dfrac{e^x-1}{x}$ より $e^{-x}\Phi(x)=\Phi(-x)$ であるから，⑤が得られる．

(3) ④の両辺に左から $\Phi(\mathrm{adj}(A))^{-1}$ を作用させると，

$$\begin{aligned}\delta A&=\Phi(\mathrm{adj}(A))^{-1}((\delta e^A)e^{-A})\\&=\frac{\mathrm{adj}(A)}{e^{\mathrm{adj}(A)}-1}((\delta e^A)e^{-A})\end{aligned}$$

を得る．$e^A=F$ とおくと，③より，$e^{\mathrm{adj}(A)}=\mathrm{Adj}(F)$だから，

$$\delta \log F = \frac{\log \mathrm{Adj}(F)}{\mathrm{Adj}(F)-1}((\delta F)F^{-1})$$

となり，⑥が示された．⑥でFをF^{-1}におきかえると，

$$\delta \log F^{-1} = \psi(\mathrm{Adj}(F^{-1}))((\delta F^{-1})F)$$

となるが，$\log F^{-1} = -\log F$と$(\delta F^{-1})F = -F^{-1}\delta F$を使うと，⑦が得られる．

［2］ Campbell-Hausdorff の公式

線型変換A，Bに対して，e^Aとe^Bの積を，

$$e^A e^B = \exp\left(A+B+\frac{1}{2}[A,B]+\frac{1}{12}[A-B,[A,B]]+\cdots\right)$$

のように，1つの指数関数にまとめる公式を導こう．

(1) $e^{tA}e^{tB} = e^{G(t)}$とおく．前問の結果を使って，

$$\frac{d}{dt}G(t) = \psi[\exp(t\,\mathrm{adj}(A))\exp(t\,\mathrm{adj}(B))]A$$
$$+\psi[\exp(-t\,\mathrm{adj}(B))\exp(-t\,\mathrm{adj}(A))]B$$

を導け．

(2) $e^A e^B = \exp\left[\sum_{m=1}^{\infty}\frac{1}{m}\{Z_m(A,B)+(-1)^{m-1}Z_m(B,A)\}\right]$と書けることを示せ．ここで，

$$Z_m(A,B) = \sum_{n=1}^{\infty}\frac{(-1)^{n+1}}{n}\sum\frac{\mathrm{adj}(A)^{p_1}\mathrm{adj}(B)^{q_1}\cdots\mathrm{adj}(A)^{p_{n-1}}\mathrm{adj}(B)^{q_{n-1}}A}{p_1!\,q_1!\,p_2!\,q_2!\cdots p_{n-1}!\,q_{n-1}!}$$
$$(p_1+q_1)+\cdots+(p_{n-1}+q_{n-1}) = m-1$$
$$p_i+q_i>0 \quad (1\leqq i\leqq n-1)$$

である．これを，Campbell-Hausdorff の公式とよぶ．

(3) (7.19)で与えられるような構造定数によって，変換群の単位元近傍の性質は完全に決まってしまうことを示せ．

[解] (1) $F(t,s) = e^{tA}e^{sB}$とおくと，

$$\left(\frac{\partial}{\partial t}F(t,s)\right)F(t,s)^{-1} = A, \qquad F(t,s)^{-1}\frac{\partial}{\partial s}F(t,s) = B$$

が成り立つから，前問(3)より，

$$\frac{\partial}{\partial t}\log F(t,s) = \psi(\mathrm{Adj}(F(t,s)))A$$

$$\frac{\partial}{\partial s}\log F(t,s) = \psi(\mathrm{Adj}(F(t,s)^{-1}))B$$

を得る．$G(t) = \log F(t,t)$であるから，

$$\frac{d}{dt}G(t)=\frac{\partial}{\partial t}F(t,s)+\frac{\partial}{\partial s}F(t,s)\Big|_{s=t}$$
$$=\psi(\mathrm{Adj}(G(t))A+\psi(\mathrm{Adj}(G(t)^{-1}))B \qquad ⓐ$$

が成り立つ．ところで，

$$\begin{aligned}\mathrm{Adj}(G(t))X&=\mathrm{Adj}(e^{tA}e^{tB})X\\&=e^{tA}e^{tB}Xe^{-tB}e^{-tA}\\&=e^{tA}(e^{t\,\mathrm{adj}(B)}X)e^{-tA}\\&=e^{t\,\mathrm{adj}(A)}e^{t\,\mathrm{adj}(B)}X\end{aligned}$$

より，$\mathrm{Adj}(G(t))=\exp(t\,\mathrm{adj}(A))\exp(t\,\mathrm{adj}(B))$ であるから，ⓐは求める式になっている．

(2) $\exp(t\,\mathrm{adj}(A))\exp(t\,\mathrm{adj}(B))=1+\sum_{p+q>0}t^{p+q}\frac{1}{p!q!}\mathrm{adj}(A)^p\mathrm{adj}(B)^q$ と書けること，および，

$$\psi(y)=\frac{\log y}{y-1}=\sum_{n=1}^{\infty}\frac{(-1)^{n+1}}{n}(y-1)^{n-1}$$

を使うと，

$$\begin{aligned}&\psi(\exp(t\,\mathrm{adj}(A))\exp(t\,\mathrm{adj}(B)))A\\&=\sum_{n=1}^{\infty}\frac{(-1)^{n+1}}{n}\Big(\sum_{p+q>0}t^{p+q}\frac{1}{p!q!}\mathrm{adj}(A)^p\mathrm{adj}(B)^q\Big)^{n-1}A\\&=\sum_{n=1}^{\infty}\frac{(-1)^{n+1}}{n}\sum_{p_i+q_i>0}t^{(p_1+q_1)+\cdots+(p_{n-1}+q_{n-1})}\cdot\\&\quad\cdot\frac{\mathrm{adj}(A)^{p_1}\mathrm{adj}(B)^{q_1}\cdots\mathrm{adj}(A)^{p_{n-1}}\mathrm{adj}(B)^{q_{n-1}}A}{p_1!\,q_1!\cdots p_{n-1}!\,q_{n-1}!}\\&=\sum_{m=1}^{\infty}t^{m-1}Z_m(A,B)\end{aligned}$$

が得られる．A と B を入れかえて，t を $-t$ におきかえると，

$$\begin{aligned}&\psi(\exp(-t\,\mathrm{adj}(B))\exp(-t\,\mathrm{adj}(A)))B\\&=\sum_{m=1}^{\infty}(-t)^{m-1}Z_m(B,A)\end{aligned}$$

となるから，(1)の結果は，

$$\frac{d}{dt}G(t)=\sum_{m=1}^{\infty}t^{m-1}[Z_m(A,B)+(-1)^{m-1}Z_m(B,A)]$$

と書ける．両辺を t について 0 から 1 まで積分すると求める式が得られる．

(3) (7.18)に示されたように，変換群の単位元の近傍は e^A の形に書ける．ここで，A は生成子 $\hat{T}_a$ の適当な実係数の線型結合に i をかけたものである．ところで，上で導いた Campbell-Hausdorff の公式によると，e^A と e^B の積を e^C の形

に書くと，Cは，

$$C=A+B+\frac{1}{2}[A,B]+\frac{1}{12}[A-B,[A,B]]+\cdots$$

のように，A, B およびそれらから順次交換子を作ることによって得られるものの和で表される．構造定数を定めると，このような交換子は一意的に決まるから，C が一意的に求まることがわかる．すなわち，単位元の近傍における積の構造は，構造定数によって完全に決定されている．

[3] 状態空間のなかの $(2j+1)$ 個の状態ベクトル $|j, m\rangle$ $(m=j, j-1, \cdots, -j)$ が角運動量の演算子 $\hat{\boldsymbol{j}}$ の作用に対して(7.89)のように変換するとき，これらの状態は角運動量 j の表現をなしているという．

2組の状態ベクトル $|\psi; j, m\rangle$ $(m=j, j-1, \cdots, -j)$ および $|\varphi; j', m'\rangle$ $(m'=j', j'-1, \cdots, -j')$ がそれぞれ角運動量 j および j' の表現をなしているとき，その間の内積の m, m' 依存性は，

$$\langle\varphi; j', m'|\psi; j, m\rangle=A\delta_{j',j}\,\delta_{m',m}$$

となることを示せ．ここで，Aはmによらない定数である．

[解] (i) $|\psi; j, m\rangle$ と $|\varphi; j', m'\rangle$ は，$j\neq j'$ ならば $\hat{\boldsymbol{j}}^2$ の固有値が異なり，$m\neq m'$ ならば $\hat{j}^3$ の固有値が異なるから，おたがいに直交している．よって，これらの内積は，

$$\langle\varphi; j', m'|\psi; j, m\rangle=A_m\delta_{j',j}\delta_{m',m} \qquad ⓐ$$

のような m，m' 依存性をもつ．

(ii) (7.89)から，$\hat{j}^-|\psi; j, m\rangle=\sqrt{j(j+1)-m(m-1)}\,|\psi; j, m-1\rangle$,

$$\langle\varphi; j, m-1|\hat{j}^-=\sqrt{j(j+1)-m(m-1)}\langle\varphi; j, m|$$

であるが，第1式を $\langle\varphi; j, m-1|$ と縮約し，第2式を $|\psi; j, m\rangle$ と縮約して，2つの式を比べると，

$$\langle\varphi; j, m-1|\psi; j, m-1\rangle=\langle\varphi; j, m|\psi; j, m\rangle$$

であることがわかる．すなわち，ⓐの A_m は m によらない．

[4] $(2j+1)$ 個の演算子 $\hat{O}_{j,m}$ $(m=j, j-1, \cdots, -j)$ が角運動量の演算子 $\hat{\boldsymbol{j}}$ とつぎのような(7.89)と似た形の交換関係をみたすとき，これらの演算子は角運動量 j をもつテンソル演算子であるという．

$$[\hat{j}^3, \hat{O}_{j,m}]=m\hat{O}_{j,m},$$
$$[\hat{j}^+, \hat{O}_{j,m}]=\sqrt{j(j+1)-m(m+1)}\,\hat{O}_{j,m+1},$$
$$[\hat{j}^-, \hat{O}_{j,m}]=\sqrt{j(j+1)-m(m-1)}\,\hat{O}_{j,m-1}$$

(1) $\hat{O}_{j_1,m_1}$ $(m_1=j_1, j_1-1, \cdots, -j_1)$ が角運動量 j_1 をもつテンソル演算子であり，

$|\psi;j_2,m_2\rangle$ $(m_2=j_2,j_2-1,\cdots,-j_2)$ が角運動量 j_2 の表現をなしているとき，$\hat{O}_{j_1,m_1}|\psi;j_2,m_2\rangle$ は $\hat{\boldsymbol{j}}$ の作用に対してどのように変換するか．

(2) さらに $|\varphi;j,m\rangle$ $(m=j,j-1,\cdots,-j)$ が角運動量 j の表現をなしているとき，$\hat{O}_{j_1,m_1}$ の行列要素は，

$$\langle\varphi;j,m|\hat{O}_{j_1,m_1}|\psi;j_2,m_2\rangle=AC^{j,m}_{m_1,m_2}$$

のような m,m_1,m_2 依存性をもつことを示せ．ここで $C^{j,m}_{m_1,m_2}$ は角運動量 j_1,j_2 の合成に関する Clebsch-Gordan 係数であり，A は m,m_1,m_2 にはよらない数である．これは，Wigner-Eckart の定理とよばれている．

[解]　(1) $\hat{\boldsymbol{j}}\,\hat{O}_{j_1,m_1}|\psi;j_2,m_2\rangle$

$$=[\hat{\boldsymbol{j}},\hat{O}_{j_1,m_1}]|\psi;j_2,m_2\rangle+\hat{O}_{j_1,m_1}\hat{\boldsymbol{j}}|\psi;j_2,m_2\rangle$$

と書けるから，$\hat{O}_{j_1,m_1}|\psi;j_2,m_2\rangle$ は $\hat{\boldsymbol{j}}$ の作用に対して，角運動量の大きさが j_1 と j_2 のものを合成した系の状態ベクトル $|j_1,m_1\rangle|j_2,m_2\rangle$ のように変換する．

(2) Clebsch-Gordan 係数は，$(2j_1+1)(2j_2+1)$ 次元空間の基底 $|j_1,m_1\rangle|j_2,m_2\rangle$ $(m_1=j_1,j_1-1,\cdots,-j_1;\ m_2=j_2,j_2-1,\cdots,-j_2)$ から，基底 $|j,m\rangle\!\rangle$ $(j=j_1+j_2,\cdots,|j_1-j_2|;\ m=j,j-1,\cdots,-j)$ へのユニタリー変換の行列

$$C^{j,m}_{m_1,m_2}=\langle\!\langle j,m|j_1,m_1\rangle|j_2,m_2\rangle$$

として定義されたが，これは，$|j_1,m_1\rangle|j_2,m_2\rangle$ の線型結合

$$\sum_{m_1,m_2}C^{j,m*}_{m_1,m_2}|j_1,m_1\rangle|j_2,m_2\rangle=|j,m\rangle\!\rangle$$

が，角運動量 j の表現をなすことを意味しているのであった．(1)でみたように，$\hat{O}_{j_1,m_1}|\psi;j_2,m_2\rangle$ は $\hat{\boldsymbol{j}}$ の作用に対して $|j_1,m_1\rangle|j_2,m_2\rangle$ と同じように変換するから，各 j の値に対して

$$\sum_{m_1,m_2}C^{j,m*}_{m_1,m_2}\hat{O}_{j_1,m_1}|\psi;j_2,m_2\rangle=|\xi;j,m\rangle \qquad ⓐ$$

のような状態$(m=j,j-1,\cdots,-j)$をつくるとそれは，角運動量 j の表現をなす．$C^{j,m}_{m_1,m_2}$ は，ユニタリー行列であるから簡単に逆がとれて，ⓐは，

$$\hat{O}_{j_1,m_1}|\psi;j_2,m_2\rangle=\sum_{j,m}C^{j,m}_{m_1,m_2}|\xi;j,m\rangle$$

と書きかえることができる．両辺を $\langle\varphi;j,m|$ と縮約して，前問の結果を使うと，求める式が得られる．

[5]　数学的ないい方をすると，角運動量の表現とは，$SO(3)$ あるいはそれと局所同型な $SU(2)$ の単位元近傍の局所的な表現のことであった．

(1) 角運動量の大きさが整数であるような表現は，$SO(3)$ の大域的な表現に拡大できるが，半整数のものはそうでないことを示せ．

(2) 角運動量の表現は，その大きさが整数であっても半整数であっても常に $SU(2)$

の大域的な表現に拡大できることを示せ.

[解] (1) 角運動量の大きさが整数のものは，球関数 $Y_l^m(\theta,\varphi)$ として表すことができる．それらは3次元空間内の関数であるから，任意の有限回転に対して変換の方法が一意的に定まっている．すなわち，$Y_l^m(\theta,\varphi)$ $(m=l, l-1, \cdots, -l)$ は $SO(3)$ の $(2l+1)$ 次元の大域的表現をなしている．一般に角運動量の表現が，$SO(3)$ の大域的な表現に拡大されるためには，z 軸のまわりの 2π 回転に対応する演算子 $\exp(i2\pi\hat{j}^3)$ が単位行列である必要がある．なぜならば，そのような操作は，$SO(3)$ の元としては何もしない操作，すなわち単位元に等しいはずだからである．角運動量の大きさ j が整数のときは，$\hat{j}^3$の固有値はすべて整数であるから，たしかに $\exp(i2\pi\hat{j}^3)$ は単位行列に等しい．ところが，j が半整数のときは，$\hat{j}^3$ の固有値はすべて半整数であるから，$\exp(i2\pi\hat{j}^3)$ は単位行列の符号をかえたものになってしまう．これは，j が半整数のものは，$SO(3)$ の大域的表現とみなせないことを意味している．

(2) $SU(2)$ は単連結 Lie 群であるから，7.2節の一般論からわかるように，任意の局所表現は大域的表現に拡大できる．あるいは，角運動量の任意の表現が高階スピノルで表されることからも，具体的に $SU(2)$ の大域的な表現になっていることがわかる．

付　　　録

A. 特　殊　関　数

量子力学で必要となるような，いくつかの特殊関数の基本的な性質をまとめておこう．

A-1　直交多項式

区間 I 上で定義された1変数関数の間に，つぎのような内積を定義しよう．

$$(f, g)=\int_I dx\rho(x)f(x)^*g(x) \tag{A.1}$$

ここで，$\rho(x)$ は I 上で常に正であり，任意の k ($k=0, 1, 2, \cdots$) に対して $\int_I dx\rho(x) x^k$ が有限となるようなものとする．また，I としては有限区間 $[-1, 1]$，半無限区間 $[0,\infty)$，無限区間 $(-\infty, \infty)$ の3つの場合を考える．

このように定義された内積に関して，単項式の列 $1, x^1, x^2, x^3, \cdots$ を Gram-Schmidt 流に直交化したもの $h_0(x), h_1(x), h_2(x), \cdots$ をこの内積に関する直交多項式とよぶ．すなわち，$h_k(x)$ ($k=0, 1, 2, \cdots$) は x の k 次の多項式であり，

$$(h_k, h_l)=\int_I dx\rho(x)h_k{}^*(x)h_l(x)=\delta_{k,l} \tag{A.2}$$

をみたす．

いま，与えられた $\rho(x)$ に対して，I 上の関数 $X(x)$ をうまくとって，

$$F_n(x)=\frac{1}{\rho(x)}\frac{d^n}{dx^n}(\rho(x)X(x)^n) \tag{A.3}$$

が任意の $n=0, 1, 2, \cdots$ に対して n 次の多項式になったとしよう．このとき，$F_n(x)$ を適当に規格化してやったものが直交多項式 $h_n(x)$ になっている．それは，$m<n$ なる任意の m に対して，

$$\begin{aligned}(x^m, F_n(x))&=\int_I dx\rho(x)x^m F_n(x)\\ &=\int_I dx\rho(x)x^m\frac{1}{\rho(x)}\frac{d^n}{dx^n}(\rho(x)X(x)^n)\end{aligned} \tag{A.4}$$

$$=(-1)^n\int_I dx\rho(x)\left(\frac{d^n}{dx^n}x^m\right)X(x)^n$$
$$=0$$

となるからである．ここで2行目から3行目への変形には部分積分を行ったため，厳密にいうとIの両端で

$$\left[\frac{d^k}{dx^k}(\rho(x)X(x)^n)\right]_{I\text{の両端}}=0,\ (k=0,1,2,\cdots,n-1) \tag{A.5}$$

が成り立っていることが必要である．

任意の$\rho(x)$に対してこのようにつごうのよい$X(x)$が存在するわけではないが，応用上はそのような$X(x)$が存在する場合がしばしば現れる．以下では，$X(x)$が存在ししかも2次以下の実多項式であるような場合を考える．このような場合の特徴は，直交多項式$F_n(x)$ $(n=0,1,2,\cdots)$が$\hat{O}=\frac{1}{\rho}\frac{d}{dx}\rho X\frac{d}{dx}$という2階の微分演算子の固有ベクトルになっていることである．すなわち，

$$\frac{1}{\rho}\frac{d}{dx}\rho X\frac{d}{dx}F_n=\lambda_n F_n \tag{A.6 a}$$

ここで，以下に示すように，λ_nは，

$$\lambda_n=nF_1'+\frac{n(n-1)}{2}X'' \tag{A.6 b}$$

で与えられる定数である．

これを示すためには，$\hat{O}$が，

$$\hat{O}=\frac{1}{\rho}\frac{d}{dx}\rho X\frac{d}{dx}=\frac{1}{\rho}\left(\frac{d}{dx}\rho X\right)\frac{d}{dx}+X\frac{d^2}{dx^2}$$
$$=F_1(x)\frac{d}{dx}+X\frac{d^2}{dx^2} \tag{A.7}$$

と書けること，および$\hat{O}$がエルミートであること

$$(g,\hat{O}f)=(\hat{O}g,f) \tag{A.8}$$

に気づけばよい．そうすると，(A.7)より$\hat{O}F_n$はxのn次式であることがわかるし，さらに，(A.8)より$m<n$なる任意のmに対して，

$$(x^m,\hat{O}F_n(x))=(\hat{O}x^m,F_n(x))$$
$$=(m\text{次以下の多項式},\ F_n(x)) \tag{A.9}$$
$$=0$$

となることがわかる．これは，$\hat{O}F_n$がF_nじしんに比例すること，すなわち(A.6 a)を意味している．(A.6 a)の両辺のx^nの係数に注目し，(A.7)を使うとただちに(A.6 b)が得られる．

はじめに述べたとおり区間 I のとり方として，有限区間，半無限区間，無限区間の 3 つの場合を考えるが，それぞれの場合のもっとも簡単な例が Legendre 多項式，Laguerre 多項式，Hermite 多項式となっている．

Legendre 多項式

区間 I として有限区間 $[-1,1]$ をとり，$\rho(x)=1$ とする．このとき $X=(1-x^2)=(1+x)(1-x)$ とすると，(A.3)で与えられる $F_n(x)$ は明らかに n 次の多項式である．これを $x=1$ における値が 1 に等しくなるように規格化したものを Legendre の多項式とよび，$P_n(x)$ と書く．すなわち，

$$P_n(x)=\frac{1}{2^n n!}\frac{d^n}{dx^n}(x^2-1)^n \tag{A.10}$$

とする．(A.3) より $F_1(x)=-2x$ となることに注意すると，(A.6) は，

$$\left(\frac{d}{dx}(1-x^2)\frac{d}{dx}+n(n+1)\right)P_n(x)=0 \tag{A.11}$$

と書けることがわかる．これを Legendre の微分方程式とよぶ．

Laguerre 多項式

区間 I として半無限区間 $[0,\infty)$ をとり，$\rho(x)=e^{-x}$ とする．このとき，$X(x)=x$ とすると，(A.3)で与えられる $F_n(x)$ が n 次の多項式であることは明らかであろう．これを Laguerre 多項式とよび，$L_n(x)$ と書く．

$$L_n(x)=e^x\frac{d^n}{dx^n}(e^{-x}x^n) \tag{A.12}$$

(A.3) より，$F_1(x)=-x+1$ となるから，(A.6) は，

$$\begin{aligned}&\left\{e^x\frac{d}{dx}(e^{-x}x)\frac{d}{dx}+n\right\}L_n(x)\\&=\left\{x\frac{d^2}{dx^2}+(1-x)\frac{d}{dx}+n\right\}L_n(x)=0\end{aligned} \tag{A.13}$$

となる．これを Laguerre の微分方程式とよぶ．

Hermite 多項式

区間 I として無限区間 $(-\infty,\infty)$ をとり，$\rho(x)=e^{-x^2}$ とする．このとき，$X=1$ とすると(A.3)で与えられる $F_n(x)$ は明らかに n 次の多項式である．$F_n(x)$ に $(-1)^n$ をかけたものを Hermite 多項式とよび，$H_n(x)$ と書く．

$$H_n(x)=(-1)^n e^{x^2}\frac{d^n}{dx^n}e^{-x^2} \tag{A.14}$$

(A.3) より $F_1(x)=-2x$ であるから，(A.6) は，

$$\left(e^{x^2}\frac{d}{dx}e^{-x^2}\frac{d}{dx}+2n\right)H_n(x)$$

$$=\left(\frac{d^2}{dx^2}-2x\frac{d}{dx}+2n\right)H_n(x)=0 \tag{A.15}$$

となる．これを Hermite の微分方程式とよぶ．

A-2　合流型超幾何関数

1 変数 z の関数 $u(z)$ に対する微分方程式で，

$$\left\{z\frac{d^2}{dz^2}+(\gamma-z)\frac{d}{dz}-\alpha\right\}u=0 \tag{A.16}$$

の形のものを合流型超幾何微分方程式という．z が 0 および無限大のまわりにあるときは，(A.16) は，

$$\left(z\frac{d^2}{dz^2}+\gamma\frac{d}{dz}\right)u=0 \quad (z\sim 0) \tag{A.17 a}$$

$$\left(\frac{d^2}{dz^2}-\frac{d}{dz}\right)u=0 \quad (z\sim\infty) \tag{A.17 b}$$

となるから，1 次独立な 2 つの解は $z\sim 0$ のまわりでは，

$$u\sim z^0, \quad z^{1-\gamma} \quad (z\sim 0) \tag{A.18 a}$$

のようにふるまい，$z\to\infty$ のときは，

$$u\sim e^{0\cdot z}, \quad e^z \quad (z\to\infty) \tag{A.18 b}$$

のようにふるまうことがわかる．

$z\sim 0$ のまわりで，$u\sim z^0$ のようにふるまう解を，

$$u(z)=\sum_{k=0}^{\infty}c_k z^k \tag{A.19}$$

の形に級数展開して (A.16) に代入し，z^k の係数をみると，

$$(k+1)(\gamma+k)c_{k+1}-(\alpha+k)c_k=0 \tag{A.20}$$

が得られる．$c_0=1$ とおくと，容易に，

$$c_k=\frac{\alpha(\alpha+1)(\alpha+2)\cdots(\alpha+k-1)}{k!\,\gamma(\gamma+1)(\gamma+2)\cdots(\gamma+k-1)} \tag{A.21}$$

であることがわかる．この c_k を (A.19) に代入したものを $F(\alpha\,;\gamma\,;z)$ と書き，合流型超幾何関数とよぶ．γ が負の整数か 0 のときは少し注意が必要であるが，以下では $\gamma>0$ の場合だけを考えることにする．

$F(\alpha\,;\gamma\,;z)$ の $z\to\infty$ のまわりでのふるまいを調べよう．(A.21) からわかるように，α が負の整数でも 0 でもなければ，c_k $(k=0,1,2,\cdots)$ はどれも 0 ではなく，おおまかには，大きな k に対して $c_k\sim\dfrac{1}{k!}$ のようにふるまうといってよい．なぜならば，k が大きいときは，(A.21) の右辺の分子の $\alpha(\alpha+1)\cdots\alpha(\alpha+k-1)$ はおおざっぱには分母の $\gamma(\gamma+1)\cdots\gamma(\gamma+k-1)$ と相殺するからである．

これは，$z\to\infty$ のとき $F(\alpha;\gamma;z)$ が e^z のようにふるまうことを意味しているが，それは(A.18b)からもわかっていたことである．ところが，もし α が負の整数か 0 であれば，(A.21)で与えられる c_k ははじめのいくつか以外はすべて 0 となる．いいかえると，この場合は，$F(\alpha;\gamma;z)$ は z の $-\alpha$ 次の多項式であり，(A.18b)の第 1 の場合 $u\sim e^{0\cdot z}$ に相当している．

多項式 $F(-n;\gamma;z)\,(n=0,1,2,\cdots)$ は，半無限区間 $[0,\infty)$ 上の直交多項式ともみなせることに注意しよう．実際，(A.3)において，

$$\rho(x)=e^{-x}x^{\gamma-1} \tag{A.22 a}$$

$$X(x)=x \tag{A.22 b}$$

とおくと，

$$F_n(x)=e^x x^{1-\gamma}\frac{d^n}{dx^n}(e^{-x}x^{n+\gamma-1}) \tag{A.23}$$

となるが，とくに $F_1(x)=-x+\gamma$ であるから，(A.6)から，

$$\begin{aligned}&\left\{e^x x^{1-\gamma}\frac{d}{dx}(e^{-x}x^{\gamma})\frac{d}{dx}+n\right\}F_n(x)\\&=\left\{x\frac{d^2}{dx^2}+(\gamma-x)\frac{d}{dx}+n\right\}F_n(x)=0\end{aligned} \tag{A.24}$$

が得られる．これは，(A.16)で z を x に書きかえて $\alpha=-n$ とおいたものにほかならないから，$F(-n;\gamma;x)$ は(A.23)で与えられる $F_n(x)$ の定数倍に等しい．

1 体の Schrödinger 方程式を変数分離した場合，合流型超幾何微分方程式に帰着できることがしばしばあるが，ここでは実際，

$$\left\{\frac{d^2}{dx^2}+\left(a+\frac{b}{x}\right)\frac{d}{dx}+\left(A+\frac{B}{x}+\frac{C}{x^2}\right)\right\}u=0 \tag{A.25}$$

の形の微分方程式が合流型に帰着することを示そう．このような形の微分方程式は，Coulomb 場内の荷電粒子の動径波動関数や Bessel 関数，球 Bessel 関数に関連して頻繁に現れる．

(A.25)を合流型に帰着するために，まず x が 0 および無限大に近いときの漸近的なふるまいを調べよう．(A.25)で $x\sim 0$ および $x\to\infty$ で $\dfrac{d^2}{dx^2}$ と同じオーダーの項を残すと，

$$\left\{\frac{d^2}{dx^2}+\frac{b}{x}\frac{d}{dx}+\frac{C}{x^2}\right\}u=0 \quad (x\sim 0) \tag{A.26 a}$$

$$\left\{\frac{d^2}{dx^2}+a\frac{d}{dx}+A\right\}u=0 \quad (x\to\infty) \tag{A.26 b}$$

となる．これから1次独立な2つの解は $x\sim 0$ のまわりでは，

$$u\sim x^{s_\pm}\quad (x\sim 0) \tag{A.27 a}$$

のようにふるまい，$x\to\infty$ のときは，

$$u\sim e^{\kappa_\pm x}\quad (x\to\infty) \tag{A.27 b}$$

のようにふるまうことがわかる．ここで，$s_\pm$，$\kappa_\pm$ はそれぞれ，

$$s(s-1)+bs+C=0 \tag{A.28 a}$$

$$\kappa^2+a\kappa+A=0 \tag{A.28 b}$$

の2つの解である．

$x\sim 0$ および $x\to\infty$ におけるふるまいを因子として出してしまい，

$$u(x)=x^s e^{\kappa x}v(x) \tag{A.29}$$

とおこう．ここで，s，κ はそれぞれ(A.28 a)，(A.28 b)の根のどちらか一方とする．(A.29)を(A.25)に代入し，両辺を $x^s e^{\kappa x}$ でわったものは，

$$(x^s e^{\kappa x})^{-1}\frac{d}{dx}(x^s e^{\kappa x})=\frac{d}{dx}+\left(\kappa+\frac{s}{x}\right),$$

$$(x^s e^{\kappa x})^{-1}\frac{d^2}{dx^2}(x^s e^{\kappa x})=\left\{\frac{d}{dx}+\left(\kappa+\frac{s}{x}\right)\right\}^2$$

$$=\frac{d^2}{dx^2}+2\left(\kappa+\frac{s}{x}\right)\frac{d}{dx}+\left(\kappa^2+\frac{2s\kappa}{x}+\frac{s(s-1)}{x^2}\right) \tag{A.30}$$

などを使うと簡単に計算できて，

$$\left[\frac{d^2}{dx^2}+\left\{(a+2\kappa)+\frac{b+2s}{x}\right\}\frac{d}{dx}\right.$$
$$\left.+\left\{(A+a\kappa+\kappa^2)+\frac{B+as+b\kappa+2s\kappa}{x}+\frac{C+bs+s(s-1)}{x^2}\right\}\right]v=0 \tag{A.31}$$

となる．s，κ が(A.28)をみたすことを使うと，けっきょく，

$$\left[\frac{d^2}{dx^2}+\left\{(a+2\kappa)+\frac{b+2s}{x}\right\}\frac{d}{dx}+\frac{B+as+b\kappa+2s\kappa}{x}\right]v=0 \tag{A.32}$$

が得られるが，これは，$-(a+2\kappa)x$ を z とおくと(A.16)の形に帰着される．

A-3　球 Bessel 関数

3次元粒子の Schrödinger 方程式は，ポテンシャルが0であるような領域では，

$$(\Delta+k^2)\psi=0 \tag{A.33}$$

と書ける．これを極座標で変数分離すると，動径部分がみたす微分方程式は，$x=kr$ として，

$$\left\{\frac{d^2}{dx^2}+\frac{2}{x}\frac{d}{dx}+\left(1-\frac{l(l+1)}{x^2}\right)\right\}u_l=0 \tag{A.34}$$

となる．ここで，$l=0,1,2,\cdots$ は角運動量の大きさである．これは，各 l ごとに2つの独立な解をもつが，それらを総称して l 次の球 Bessel 関数とよぶ．

(A.34)は(A.25)の特殊な場合であるから，合流型に帰着することができる．しかしながら，ここで考えているように，l が整数であるような場合は，u_l は初等関数で書けてしまう．その具体的な形を求めるために，$u_l\,(l=0,1,2,\cdots)$ に対する漸化式をつくろう．まず，

$$u_l=x^lR_l \tag{A.35}$$

とおいて(A.34)を書きかえると，

$$\left\{\frac{d^2}{dx^2}+\frac{2(l+1)}{x}\frac{d}{dx}+1\right\}R_l=0 \tag{A.36}$$

となるが，この両辺を x で微分すると，

$$\left\{\frac{d^2}{dx^2}+\frac{2(l+1)}{x}\frac{d}{dx}+1-\frac{2(l+1)}{x^2}\right\}\frac{d}{dx}R_l=0 \tag{A.37}$$

が得られる．さらに，

$$\frac{d}{dx}R_l=xf_l \tag{A.38}$$

とおいて(A.37)を書きかえると，

$$\left\{\frac{d^2}{dx^2}+\frac{2(l+2)}{x}\frac{d}{dx}+1\right\}f_l=0 \tag{A.39}$$

となるが，(A.36)からわかるように，これは R_{l+1} のみたすべき微分方程式である．よって，R_l が(A.36)の解であれば，

$$R_{l+1}=\frac{1}{x}\frac{d}{dx}R_l \tag{A.40}$$

は，(A.36)で l を $l+1$ にしたものの解になっていることがわかった．

(A.35)を使って u_l にもどると，(A.40)は，

$$u_{l+1}=x^l\frac{d}{dx}(x^{-l}u_l) \tag{A.41}$$

と書けるが，これを繰り返し適用すると，

$$\begin{aligned}u_l&=x^{l-1}\frac{d}{dx}(x^{-l+1}u_{l-1})\\&=x^{l-1}\frac{d}{dx}\left(x^{-l+1}x^{l-2}\frac{d}{dx}(x^{-l+2}u_{l-2})\right)\\&=\cdots\cdots\\&=x^l\left(\frac{1}{x}\frac{d}{dx}\right)^l u_0\end{aligned} \tag{A.42}$$

となり，$l=0$ の場合がわかれば，任意の l に対する解がつくれることがわかった．

$l=0$ の場合は，(A.34)は，

$$\left(\frac{d^2}{dx^2}+1\right)(xu_0)=0 \tag{A.43}$$

となるから，2つの独立な解として，

$$u_0=\frac{1}{x}\sin x,\quad -\frac{1}{x}\cos x \tag{A.44 a}$$

のようにとってもよいし，あるいは，

$$u_0=\frac{1}{ix}e^{ix},\quad \frac{1}{-ix}e^{-ix} \tag{A.44 b}$$

のようにとってもよい．これらの u_0 を(A.42)に代入して因子 $(-1)^l$ をかけたものを，

$$\begin{aligned} j_l(x)&=(-1)^l x^l\left(\frac{1}{x}\frac{d}{dx}\right)^l\frac{\sin x}{x},\quad n_l(x)=(-1)^l x^l\left(\frac{1}{x}\frac{d}{dx}\right)^l\frac{\cos x}{-x}\\ h_l^{(1)}(x)&=(-1)^l x^l\left(\frac{1}{x}\frac{d}{dx}\right)^l\frac{e^{ix}}{ix},\quad h_l^{(2)}(x)=(-1)^l x^l\left(\frac{1}{x}\frac{d}{dx}\right)^l\frac{e^{-ix}}{-ix} \end{aligned} \tag{A.45}$$

のような記号で書くことが多い．

この表式から容易にわかるように，$j_l(x)$ は原点 $x=0$ の付近で正則であり，

$$j_l(x)\sim\frac{1}{(2l+1)!!}x^l \quad (x\sim 0) \tag{A.46}$$

のようにふるまうが，$n_l, h_l^{(1)}, h_l^{(2)}$ はいずれも原点の付近で正則ではなく x^{-l-1} に比例して発散している．

最後に，$x\to\infty$ における漸近形について考えよう．(A.45)に現れる微分をつぎつぎに遂行していくと，$x^{-m}\times$(3角関数) のような形の項の和になるが，微分が x^{-m} に作用すると x のべきが1だけ下がるのに対して，微分が3角関数のほうに作用したときは x のべきを変えない．よって，$x\to\infty$ のふるまいを調べるためには，(A.45)の l 個の微分はすべて3角関数や指数関数に作用するとしてよい．そうすると，

$$\left.\begin{aligned} j_l(x)&\sim\frac{(-1)^l}{x}\frac{d^l}{dx^l}\sin x &&=\frac{1}{x}\sin\left(x-\frac{\pi}{2}l\right)\\ n_l(x)&\sim-\frac{(-1)^l}{x}\frac{d^l}{dx^l}\cos x &&=-\frac{1}{x}\cos\left(x-\frac{\pi}{2}l\right)\\ h_l^{(1)}(x)&\sim\frac{(-1)^l}{ix}\frac{d^l}{dx^l}e^{ix} &&=\frac{1}{ix}\exp\left[i\left(x-\frac{\pi}{2}l\right)\right]\\ h_l^{(2)}(x)&\sim\frac{(-1)^l}{-ix}\frac{d^l}{dx^l}e^{-ix} &&=\frac{1}{-ix}\exp\left[-i\left(x-\frac{\pi}{2}l\right)\right] \end{aligned}\right\}\quad (x\to\infty) \tag{A.47}$$

を得る．

B. 曲線座標におけるラプラシアン

直交座標 x^a $(a=1, 2, \cdots, D)$ をもつ D 次元空間のラプラシアン

$$\Delta=\sum_{a=1}^{D}\left(\frac{\partial}{\partial x^a}\right)^2 \tag{B.1}$$

を曲線座標 ξ^μ $(\mu=1, 2, \cdots, D)$ で表す公式を与えよう．

x^a による微分と ξ^μ による微分を変換するチェイン・ルールに現れる係数を，

$$e_\mu{}^a=\frac{\partial x^a}{\partial \xi^\mu}, \quad e_a{}^\mu=\frac{\partial \xi^\mu}{\partial x^a} \tag{B.2}$$

と書くことにすると，これらはたがいに逆行列であるから，

$$e_\mu{}^a e_a{}^\nu=\delta_\mu{}^\nu, \quad e_\mu{}^a e_b{}^\mu=\delta^a{}_b \tag{B.3}$$

をみたしている．また，$e_\mu{}^a$ を D 行 D 列の行列とみなして，その行列式を e と書こう．すなわち，

$$e=\det(e_\mu{}^a) \tag{B.4}$$

一般に，行列 M が微小量 δM だけ変化したとき，行列式の変化は，

$$\begin{aligned}\delta(\det M)&=\det(M+\delta M)-\det M\\&=\det(M(1+M^{-1}\delta M))-\det M\\&=\det M\cdot\det(1+M^{-1}\delta M)-\det M\\&=\det M(1+\mathrm{Tr}(M^{-1}\delta M))-\det M+O(\delta M^2)\\&=\det M\cdot\mathrm{Tr}(M^{-1}\delta M)+O(\delta M^2)\end{aligned} \tag{B.5}$$

と書けることを使うと，$e=\det(e_\mu{}^a)$ の ξ^ν による微分は，

$$\frac{\partial e}{\partial \xi^\nu}=e\cdot e_a{}^\mu\frac{\partial e_\mu{}^a}{\partial \xi^\nu} \tag{B.6}$$

と書ける．(B.2)の第1式より，

$$\frac{\partial e_\mu{}^a}{\partial \xi^\nu}=\frac{\partial}{\partial \xi^\nu}\frac{\partial}{\partial \xi^\mu}x^a=\frac{\partial}{\partial \xi^\mu}\frac{\partial}{\partial \xi^\nu}x^a=\frac{\partial e_\nu{}^a}{\partial \xi^\mu} \tag{B.7}$$

となることを使うと，(B.6)は，

$$\frac{1}{e}\frac{\partial e}{\partial \xi^\nu}=e_a{}^\mu\frac{\partial e_\nu{}^a}{\partial \xi^\mu} \tag{B.8}$$

と書いてもよいが，これは微分演算子として，

$$\frac{1}{e}\frac{\partial}{\partial \xi^\nu}e=e_a{}^\mu\frac{\partial}{\partial \xi^\mu}e_\nu{}^a \tag{B.9}$$

が成り立つことを意味している．実際，(B.9)の両辺は，

$$(\text{左辺})=\frac{\partial}{\partial \xi^\nu}+\frac{1}{e}\frac{\partial e}{\partial \xi^\nu}$$

$$(右辺)=e_a{}^{\mu}e_{\nu}{}^{a}\frac{\partial}{\partial\xi^{\mu}}+e_a{}^{\mu}\frac{\partial e_{\nu}{}^{a}}{\partial\xi^{\mu}} \tag{B.10}$$

となるが，第1項どうしは(B.3)の第1式から等しく，第2項どうしは(B.8)により等しい．

(B.9)の両辺に右から $e_b{}^{\nu}$ をかけて，右辺では(B.3)の第2式より $e_{\nu}{}^{a}e_b{}^{\nu}=\delta^a{}_b$ となることを使うと，

$$\frac{1}{e}\frac{\partial}{\partial\xi^{\nu}}ee_b{}^{\nu}=e_b{}^{\mu}\frac{\partial}{\partial\xi^{\mu}} \tag{B.11}$$

が得られる．これを使ってラプラシアン(B.1)をつぎのように書きかえてみよう．まず，チェイン・ルールから，

$$\frac{\partial}{\partial x^a}=\frac{\partial\xi^{\mu}}{\partial x^a}\frac{\partial}{\partial\xi^{\mu}}=e_a{}^{\mu}\frac{\partial}{\partial\xi^{\mu}} \tag{B.12}$$

だから，(B.1)は，

$$\Delta=\sum_{a=1}^{D}e_a{}^{\mu}\frac{\partial}{\partial\xi^{\mu}}e_a{}^{\lambda}\frac{\partial}{\partial\xi^{\lambda}} \tag{B.13}$$

とかけるが，右辺の第1因子を(B.11)を使って書きなおすと，

$$\Delta=\sum_{a=1}^{D}\frac{1}{e}\frac{\partial}{\partial\xi^{\nu}}ee_a{}^{\nu}e_a{}^{\lambda}\frac{\partial}{\partial\xi^{\lambda}} \tag{B.14}$$

となる．

ここで，計量テンソル $g_{\mu\nu}$，$g^{\mu\nu}$ を，

$$g_{\mu\nu}=e_{\mu}{}^{a}e_{\nu}{}^{a},\quad g^{\mu\nu}=e_a{}^{\mu}e_a{}^{\nu} \tag{B.15}$$

で導入しよう．これらがたがいに逆行列であることは，(B.3)を使って，

$$\begin{aligned}g_{\mu\nu}g^{\nu\lambda}&=e_{\mu}{}^{a}e_{\nu}{}^{a}e_b{}^{\nu}e_b{}^{\lambda}=e_{\mu}{}^{a}\delta^a{}_be_b{}^{\lambda}\\&=e_{\mu}{}^{a}e_a{}^{\lambda}=\delta_{\mu}{}^{\nu}\end{aligned} \tag{B.16}$$

のようにすればすぐにわかる．また，$e_{\mu}{}^{a}$ を行列Eの μ 行 a 列の成分とみなすと，(B.15)の第1式は $g_{\mu\nu}$ が $E\,{}^tE$ の μ, ν 成分であることを示している．よって $g_{\mu\nu}$ の行列式を g と書くと，

$$g=\det(g_{\mu\nu})=\det(E\,{}^tE)=(\det E)^2=e^2 \tag{B.17}$$

となる．(B.15)および(B.17)を使って(B.14)を書きかえると，最終的な表式

$$\Delta=\frac{1}{\sqrt{g}}\frac{\partial}{\partial\xi^{\nu}}\sqrt{g}\,g^{\nu\lambda}\frac{\partial}{\partial\xi^{\lambda}} \tag{B.18}$$

が得られる．

計量テンソルの幾何学的な意味を確認するために，曲線座標が ξ^{μ} の点と $\xi^{\mu}+d\xi^{\mu}$ の点の間の距離の2乗 ds^2 を求めてみよう．ここで，$d\xi^{\mu}$ は無限小量とする．これらの2点の直交座標を x^a および x^a+dx^a とすると，

$$dx^a = \frac{\partial x^a}{\partial \xi^\mu} d\xi^\mu = e_\mu{}^a d\xi^\mu \tag{B.19}$$

となっているはずだから，距離の 2 乗は，

$$\begin{aligned} ds^2 &= \sum_{a=1}^{D} (dx^a)^2 = \sum_{a=1}^{D} e_\mu{}^a d\xi^\mu e_\nu{}^a d\xi^\nu \\ &= g_{\mu\nu} d\xi^\mu d\xi^\nu \end{aligned} \tag{B.20}$$

で与えられることがわかる．

ここでは，公式(B.18)を直交座標のラプラシアンの形(B.1)から導いたが，微分幾何でよく知られているように，(B.18)の形は，曲がった空間上でも成り立つ．

極座標の場合

3 次元の極座標では，計量は，

$$ds^2 = (dr)^2 + r^2 (d\theta)^2 + r^2 \sin^2\theta (d\varphi)^2 \tag{B.21}$$

と書ける．これを行列で書くと，

$$(g_{\mu\nu}) = \begin{pmatrix} 1 & & \\ & r^2 & \\ & & r^2\sin^2\theta \end{pmatrix} \tag{B.22}$$

であり，これから，

$$\sqrt{g} = \sqrt{\det(g_{\mu\nu})} = r^2 \sin\theta \tag{B.23}$$

$$(g^{\mu\nu}) = \begin{pmatrix} 1 & & \\ & \dfrac{1}{r^2} & \\ & & \dfrac{1}{r^2\sin^2\theta} \end{pmatrix} \tag{B.24}$$

と計算される．(B.18)にこれらを代入すると，

$$\begin{aligned} \Delta &= \frac{1}{r^2\sin\theta}\left(\frac{\partial}{\partial r} r^2 \sin\theta \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\partial}{\partial \theta} \sin\theta \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{\partial}{\partial \varphi} \frac{1}{\sin\theta} \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \\ &= \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} r^2 \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \left(\frac{1}{\sin\theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \sin\theta \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{\sin^2\theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right) \end{aligned} \tag{B.25}$$

が得られる．

有用な物理定数

真空中での光速	$c = 2.998\times10^{10}\mathrm{cm\cdot sec^{-1}}$
電気素量	$e = 1.602\times10^{-19}\mathrm{coulomb}$
電子の質量	$m_e = 0.5110\mathrm{MeV}\cdot c^{-2}$
陽子の質量	$m_p = 938.3\mathrm{MeV}\cdot c^{-2}$
中性子の質量	$m_n = 939.6\mathrm{MeV}\cdot c^{-2}$
Planck 定数	$h = 6.626\times10^{-27}\mathrm{erg\cdot sec}$
	$\hbar = \dfrac{h}{2\pi} = 1.055\times10^{-27}\mathrm{erg\cdot sec}$
	$= 0.6582\times10^{-15}\mathrm{eV\cdot sec}$
Planck 定数×c	$\hbar c = 1.97\times10^{3}\mathrm{eV\cdot Å} = 1.97\mathrm{keV\cdot Å}$
	$= 197\mathrm{MeV\cdot fm} = 197\mathrm{eV\cdot nm}$
Rydberg 定数	$R = 109{,}737\mathrm{cm^{-1}}$
	$Rhc = \dfrac{m_e e^4}{2\hbar^2} = \dfrac{e^2}{2a_0} = \alpha^2 m_e c^2/2 = 13.61\ \mathrm{eV}$
Boltzmann 定数	$k_B = 1.381\times10^{-16}\mathrm{erg\cdot K^{-1}}$
Avogadro 数	$N_0 = 6.022\times10^{23}$ モル$^{-1}$
微細構造定数	$\alpha = \dfrac{e^2}{\hbar c} = \dfrac{1}{137.04}$
電子の Compton 波長/(2π)	$\lambda\!\!\!^{-}_c = \dfrac{\hbar}{m_e c} = \dfrac{0.0243\,\mathrm{Å}}{2\pi} = 0.00387\mathrm{Å}$
Bohr 半径	$a_0 = \dfrac{\hbar^2}{m_e e^2} = 0.529\,\mathrm{Å}$
Bohr エネルギー	$E_1 = -\dfrac{m_e e^4}{2\hbar^2} = -13.6\mathrm{eV}$
Bohr 磁子	$\mu_B = \dfrac{e\hbar}{2m_e c} = 9.274\times10^{-21}\mathrm{erg\cdot Gauss^{-1}}$

$$1\,\mathrm{erg}=\frac{10^{12}}{1.602}\,\mathrm{eV}=6.242\times10^{11}\,\mathrm{eV}$$

$$1\,\mathrm{eV}=10^{-6}\,\mathrm{MeV}=1.602\times10^{-12}\,\mathrm{erg}=3.827\times10^{-20}\,\mathrm{cal}$$

$$1\,\text{Å}=10^{-8}\,\mathrm{cm}$$

$$1\,\mathrm{nm}=10^{-9}\,\mathrm{m}=10^{-7}\,\mathrm{cm}$$

$$1\,\mathrm{fm}=10^{-15}\,\mathrm{m}=10^{-13}\,\mathrm{cm}$$

$$1\,\mathrm{barn}=10^{-24}\,\mathrm{cm}^2$$

$$1\,\mathrm{mb}=10^{-27}\,\mathrm{cm}^2$$

欧文人名索引

（配列はアルファベット順，Ⅰ，Ⅱは第Ⅰ巻，第Ⅱ巻を表す）

事項索引

(配列は50音順，I，IIは第I巻，第II巻を表す)

【き】

【く】

【け】

【こ】

【さ】

【し】

【す】

【な, に, の】

【は】

【ひ】

【ふ】

【へ】

【ほ】

【ま，む，も】

【や，ゆ，よ】

【ら】

【り】

【る，れ，ろ】

著者紹介

猪木　慶治（いぎ　けいじ）

1933年岡山県出身．1956年東京大学理学部物理学科卒．同大学院を修了後，東京教育大学理学部助手，東京大学理学部講師，同助教授，同教授を経て1994年より東京大学名誉教授，1994～2004年神奈川大学理学部教授．その間，米カリフォルニア大学バークレー校研究員，プリンストン高級研究所所員，ヨーロッパ連合原子核研究機関(CERN)客員科学者として研究．専攻は素粒子論．理学博士．

川合 光（かわい ひかる）

1955年大阪府出身．1978年東京大学理学部物理学科卒．同大学院を修了後，米コーネル大学研究員，同助教授を経て，1988年東京大学理学部助教授，1993年高エネルギー物理学研究所理論部教授，1999年より京都大学大学院理学研究科教授．2002年より理化学研究所仁科加速器センター主任研究員を兼務．専攻は素粒子論．理学博士．

NDC 423　　307 p　　22 cm

量子力学 I

1994年 2 月20日　第 1 刷発行
2013年 7 月10日　第22刷発行

著　者　猪木慶治・川合 光
発行者　鈴木 哲
発行所　株式会社　講談社
〒112-8001　東京都文京区音羽2-12-21
販売部　(03)5395-3622
業務部　(03)5395-3615
編　集　株式会社　講談社サイエンティフィク
代表　矢吹俊吉
〒162-0825　東京都新宿区神楽坂 2-14　ノービィビル
編集部　(03)3235-3701
印刷所　株式会社廣済堂・半七写真印刷工業株式会社
製本所　島田製本株式会社

落丁本・乱丁本は，購入書店名を明記のうえ，講談社業務部宛にお送り下さい．送料小社負担にてお取替えします．なお，この本の内容についてのお問い合わせは講談社サイエンティフィク編集部宛にお願いいたします．定価はカバーに表示してあります．

ISBN4-06-153209-X